N° d'enregistrement
au C.N.R.S

PARIJS

# THESE

de

DOCTORAT D'ETAT ES-SCIENCES PHYSIQUES

présentée

## A L'UNIVERSITE PIERRE ET MARIE CURIE

PARIS VI

par

Alfred MAQUET

pour obtenir le grade de Docteur ès-Sciences

---

Sujet de la thèse :

APPLICATION DU FORMALISME DE LA FONCTION DE GREEN COULOMBIENNE A L'ETUDE DE PROCESSUS MULTIPHOTONIQUES.

Soutenue le 19 Juin 1975, devant la Commission d'examen

| | | |
|---|---|---|
| Mlle | Y. CAUCHOIS | Président |
| M. | R. DAUDEL | Examinateurs |
| M. | E. ARNOUS | |
| Mlle | Y. HENO | |
| M. | C. COHEN TANNOUDJI | |
| M. | S. KLARSFELD | |

N° d'enregistrement
au C.N.R.S

# THESE

de

DOCTORAT D'ETAT ES-SCIENCES PHYSIQUES

présentée

## A L'UNIVERSITE PIERRE ET MARIE CURIE

PARIS VI

par

Alfred MAQUET

pour obtenir le grade de Docteur ès-Sciences

---

Sujet de la thèse:

APPLICATION DU FORMALISME DE LA FONCTION DE GREEN COULOMBIENNE A L'ETUDE DE PROCESSUS MULTIPHOTONIQUES.

Soutenue le Juin 1975, devant la Commission d'examen

| | | |
|---|---|---|
| Mlle | Y. CAUCHOIS | Président |
| M. | R. DAUDEL | Examinateurs |
| M. | E. ARNOUS | |
| Mlle | Y. HENO | |
| M. | C. COHEN TANNOUDJI | |
| M. | S. KLARSFELD | |

UNIV.
LEIDEN
BIBL.

"Penser est une besogne de pauvre"

DADA (1916 - 1922)

A ma femme.

Juin 1975

Mademoiselle Y. CAUCHOIS, Directeur du Laboratoire de Chimie Physique de l'Université Pierre et Marie Curie a bien voulu m'accueillir dans son laboratoire. En une période difficile pour elle et pour le laboratoire je souhaite profiter de l'occasion qui m'est offerte pour rendre témoignage du profond respect qu'inspire sa haute personnalité scientifique. Au cours de fréquentes discussions elle a su me faire bénéficier de ses profondes connaissances et de la capacité de synthèse qui caractérisent sa vie de physicienne ; qu'elle trouve ici l'expression de ma sincère gratitude.

Je tiens à remercier Monsieur R. DAUDEL, Professeur, qui a bien voulu accepter de faire partie de mon jury de thèse.

Monsieur E. ARNOUS, Professeur, a suivi de près l'évolution de mon travail, montrant ainsi l'intérêt qu'il lui portait. Je l'en remercie très sincèrement.

Les recherches dont ce mémoire représente l'aboutissement ont été effectuées sous la direction de Mademoiselle Y. HENO, Professeur. Elle a été à l'origine de mon orientation actuelle en physique théorique et m'a initié à la recherche avec une attention et une patience constantes. J'ai pu ainsi profiter de sa profonde compréhension de la physique et de ses grandes qualités de pédagogue ; qu'elle sache que je lui en resterai toujours reconnaissant.

Je sais gré à Monsieur COHEN TANNOUDJI, Professeur au Collège de France, de s'être intéressé à mon travail. Qu'il trouve ici l'expression de mes remerciements.

Une bonne partie de ce travail a été effectuée en collaboration avec Monsieur S. KLARSFELD, Maître de Recherche. J'ai pu apprécier à cette occasion ses grandes qualités humaines ainsi que l'étendue et la solidité de ses connaissances théoriques. Je souhaite lui faire part de ma sincère reconnaissance.

Au sein de l'équipe dirigée par Mademoiselle Y. HENO, ma collaboration avec J.P. GAZEAU m'a été très profitable également. Le travail en commun a créé de solides liens d'amitié entre nous ; merci Jean Pierre !

Que tous mes amis du laboratoire trouvent également ici l'expression de ma cordiale sympathie.

Mademoiselle J. BOULET a assuré la frappe du texte avec beaucoup de compétence et de patience ; Monsieur ALIOUAT a réalisé l'impression offset ; Messieurs AVILA et DAX ont tracé les graphiques ; Monsieur LEBLED s'est chargé de certains tableaux manuscrits, je les remercie sincèrement pour ces travaux.

# APPLICATION DU FORMALISME DE LA FONCTION DE GREEN COULOMBIENNE A L'ETUDE DE PROCESSUS MULTIPHOTONIQUES.

Digitized by the Internet Archive
in 2026

https://archive.org/details/IA41548908_0021

I N T R O D U C T I O N PAGE 1

CHAPITRE I : LE FORMALISME DE LA FONCTION DE GREEN COULOMBIENNE. 5

I-1. Présentation 5

I-2. Méthodes de calculs des sommes infinies de la série des perturbations. 11

I-3. La représentation de J. Schwinger et les représentations équivalentes dans l'espace des impulsions. 13

I-4. Représentation intégrale de L. Hostler. 17

I-5. Représentation sturmienne de la fonction de Green dans l'espace des positions. 19

P R E M I E R E P A R T I E

PROCESSUS A DEUX PHOTONS

Introduction. 23

CHAPITRE II : TRANSITIONS RADIATIVES A DEUX PHOTONS ENTRE DEUX ETATS LIES DE L'ATOME D'HYDROGENE . EFFET DE RETARD. 24

II-1. Position du problème. 24

II-2. L'amplitude de transition exprimée dans l'espace de Fock. 26

II-3. Introduction du formalisme quaternionien. 27

II-4. Diffusion élastique sur un atome hydrogénoïde dans l'état fondamental. 32

II-5. Transition radiative à deux photons entre les niveaux $1S^{1/2}$ et $2S^{1/2}$ d'un atome hydrogénoïde. 32

II-6. Avantages et limitations de la méthode. 34

CHAPITRE III : CONTRIBUTION NON RELATIVISTE AU DEPLACEMENT DE LAMB. LOGARITHME DE BETHE. 36

III-I. Position du problème. 36

a) Travaux expérimentaux. 36

b) Travaux théoriques. 38

III-2. Le logarithme de Bethe. 40

III-3. Etats 1S à 4P : Calcul de $\Lambda_{n,\ell}(K)$ 46

III-3.A Expression analytique de $\langle n\ell|\vec{p}\ G.\vec{p}|n\ell\rangle$ 46

III-3.B Calcul de l'intégrale $\Lambda_{n,\ell}(K)$ 49

III-4. Calcul direct de Log $k_o$ $(n, \ell)$ pour $n \lesssim 8$. 54

III-5. Calcul des forces d'oscillateurs. 56

III-5.A Contribution des états discrets. 57

III-5.B Contribution des états du continuum. 60

III-6. Calculs numériques. 62

III-7. Conclusion . 63

D E U X I E M E  P A R T I E

PROCESSUS D'IONISATION MULTIPHOTONIQUE.

Introduction 65

CHAPITRE IV : IONISATION DE L'ATOME D'HYDROGENE PAR TROIS PHOTONS. 71

IV-1. Equivalence des différentes formes du hamiltonien d'interaction dans le calcul des amplitudes multiphotoniques. 71

IV-2. L'amplitude de transition et l'effet de polarisation. 76

IV-3. Partie angulaire ; polarisation linéaire. 78

IV-4. Partie angulaire ; polarisation circulaire. 82

IV-5. Effet de polarisation. 84

IV-6. Ionisation par trois photons-Partie radiale. 87

IV-7. Résultats. 91

a ) Structure résonante. 92

b ) Minima entre deux résonances. 93

c ) Comportement au seuil. 93

d ) Effet de polarisation. 93

IV-8. Section efficace au seuil d'ionisation par trois photons. 95

CHAPITRE V : IONISATION MULTIPHOTONIQUE D'ORDRE SUPERIEUR A TROIS. 98

V-1. Section efficace d'ionisation par $4 \leq N \leq 8$ photons. 99

V-2. Effet de polarisation ; valeur maximum du rapport $\sigma'/\sigma$ . 102

V-3. Le maximum théorique est-il atteint ? 105

a) Travaux basés sur la théorie de Reiss. 107

b) Travaux basés sur la théorie des perturbations. 108

V-4. Effet de polarisation pour les états excités. 109

V-5. Effet de polarisation : Résultats numériques pour les états excités. 113

1) Comportement au seuil. 114

2) Variation de l'effet de polarisation en fonction de la sous-couche d'origine. 115

V-6. Problèmes soulevés par la comparaison avec l'expérience. Ionisation par 12 photons de l'atome H. 117

V-7. Effets d'ordres supérieurs. 121

V-8. Vers les très hautes intensités... 127

V-8.A Théories reposant sur une transformation unitaire. 127

V-8.B Méthodes dans lesquelles le potentiel atomique est considéré comme une perturbation. 128

C O N C L U S I O N 134

A n n e x e A. EVALUATION DES SOMMES INFINIES DE LA THEORIE DES PERTURBATIONS PAR LA METHODE DE C. Schwartz et J.J. Tiemann. 136

A n n e x e B. EXPRESSION EN UNITES ATOMIQUES DE LA SECTION EFFICACE D'IONISATION MULTIPHOTONIQUE. 139

A n n e x e C. PROCESSUS MULTIPHOTONIQUES : CALCUL DU NOMBRE DE CHEMINS MENANT A UN ETAT FINAL DE MOMENT ANGULAIRE DETERMINE. 146

A n n e x e D. SUR DES REGLES DE SOMMES VERIFIEES PAR LES SYMBOLES 3-j. 150

B I B L I O G R A P H I E

# INTRODUCTION

A l'origine des développements récents de la physique atomique, on trouve essentiellement les progrès technologiques enregistrés dans le domaine de la spectroscopie des radio-fréquences et dans la mise en oeuvre des lasers.

L'expérience historique de W.E. LAMB et R.C. RETHERFORD (56) a été rendue possible grâce aux progrès accomplis dans le domaine des radio fréquences à la fin de la seconde guerre mondiale. La mise en évidence expérimentale de ce qu'on a appelé par la suite le déplacement de Lamb ou "Lamb shift" a été à l'origine du grand mouvement d'intérêt qui devait aboutir à l'élaboration de la théorie de l'Electrodynamique Quantique (1) (2). Depuis cette époque, les techniques expérimentales se sont constamment améliorées et raffinées, ce qui a permis d'obtenir des mesures de plus en plus précises du "Lamb-shift" dont la détermination reste l'un des tests fondamentaux de la théorie (55) (58).

D'autre part, l'utilisation plus récente de sources laser puissantes, a permis la mise en évidence de processus multiphotoniques, caractérisés par l'absorption "simultanée" de plusieurs photons par un système atomique ou moléculaire (107) (108) (111). Le problème s'est alors posé d'adapter le formalisme de l'électrodynamique quantique à l'étude de ces processus (10) (11). Dans la dernière décennie, ce sujet d'étude est devenu un thème de recherche important, au développement rapide, tant sur le plan expérimental que théorique (173).

Bien que faisant appel à des techniques expérimentales très différentes, les résultats des mesures du déplacement de Lamb et l'étude des processus multiphotoniques sont actuellement décrits théoriquement dans le cadre du formalisme de l'électrodynamique quantique. Notons que les spectaculaires progrès

expérimentaux récents n'ont pas de contre-partie dans l'interprétation théorique fondamentale. En particulier, on continue de décrire des phénomènes observés à haute intensité à l'aide d'un formalisme mis au point il y a un quart de siècle, alors que leur existence même n'était pas envisagée.

Signalons toutefois que, si aucun concept nouveau n'a été introduit depuis cette période particulièrement féconde, cela ne signifie pas que l'interprétation de ces processus n'ait pas progressé dans le cadre de cette théorie. En effet, de nouvelles techniques analytiques ont été proposées, en vue de permettre la sommation "exacte" des termes d'ordres élevés du développement perturbatif, associés à la description des processus radiatifs. La conjonction de ces progrès dans l'analyse mathématique du problème, et de la mise en service de calculateurs puissants (encore un progrès technologique !), a permis d'envisager favorablement de tels calculs. Notons que, par sommation "exacte", nous entendons un calcul dans lequel les sommes infinies caractéristiques du formalisme perturbatif (étendues par exemple à l'ensemble du spectre atomique) sont évaluées sans approximation.

La nécessité d'entreprendre de tels calculs est en relation directe avec le raffinement sans cesse croissant des mesures expérimentales. En effet, à mesure que la précision des mesures s'améliorait, la comparaison avec des résultats numériques obtenus à l'aide de calculs approchés, se révélait insuffisante...

Bien entendu ces calculs "exacts" ne peuvent être entrepris à l'heure actuelle que si l'on considère un système atomique simple. Cette circonstance explique la popularité du modèle atomique le plus simple, à savoir l'atome d'hydrogène non relativiste. L'interprétation d'expériences, impliquant des atomes complexes, à l'aide de ce dernier modèle restreint a priori la validité des résultats obtenus. Cependant il est apparu, qu'en ce qui concernait notamment les processus multiphotoniques, cette description était suffisante pour rendre compte, au moins qualitativement, de la plupart des phénomènes observés.

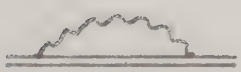
A ce jour, deux méthodes ont été proposées dans le but d'effectuer des calculs de termes d'ordres élevés du développement perturbatif. Historiquement, la première le fut par A. DALGARNO et J.T. LEWIS en 1955 (15). Cette méthode repose essentiellement sur la résolution d'un système d'équations différentielles inhomogènes. Elle a connu un développement important et a été appliquée avec succès notamment à l'étude des processus multiphotoniques (118).

La seconde repose sur l'utilisation de représentations compactes de la fonction de Green coulombienne. Des représentations de ce type ont été proposées pour la première fois en 1964 par L. HOSTLER (33) et J. SCHWINGER (18). Cette méthode plus récente que la précédente, a été moins utilisée à ce jour.

L'exposé de nos résultats est divisé en deux parties : la première partie sera consacrée aux processus à deux photons. Ainsi nous rendrons compte, respectivement :

a)

du calcul de l'amplitude de diffusion à deux photons entre deux états liés de l'hydrogène en tenant compte exactement de l'effet de retard (fig.a)


b)

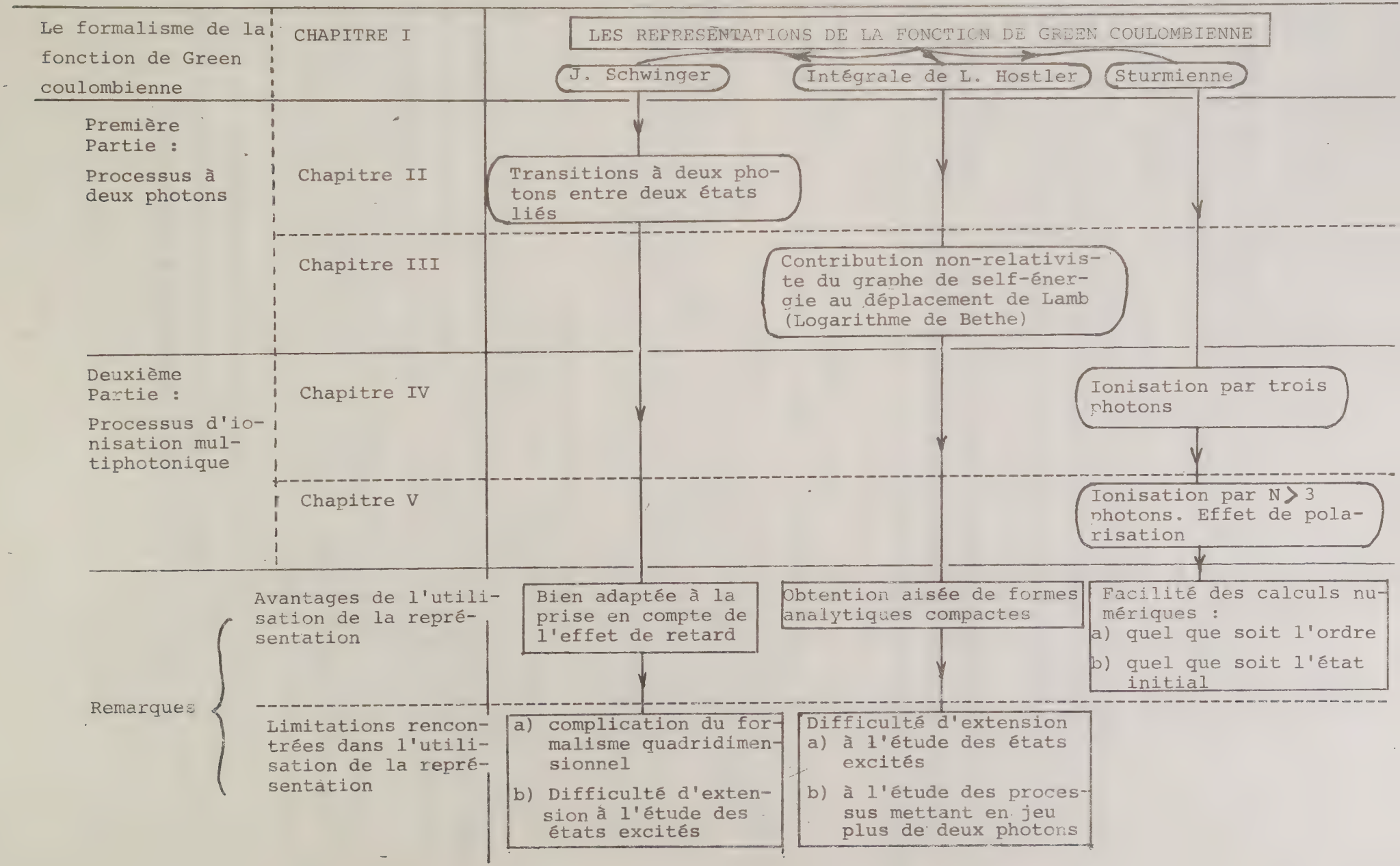
du calcul de la contribution non-relativiste du graphe de self-énergie (fig.b) au déplacement de Lamb : le logarithme de Bethe.

Dans la deuxième partie nous exposerons le calcul des sections efficaces d'ionisation par $N \leqslant 8$ photons, de l'atome d'hydrogène dans un état initial quelconque (fig.c)

c)

Nous présentons l'ensemble de ces calculs dans l'exposé qui suit dont le plan est présenté ci-après.

APPLICATION DU FORMALISME DE LA FONCTION DE GREEN COULOMBIENNE A L'ETUDE DE PROCESSUS MULTIPHOTONIQUES



# CHAPITRE I

## LE FORMALISME DE LA FONCTION DE GREEN COULOMBIENNE

Comme nous l'avons signalé dans l'introduction, la plus grande partie de notre travail repose sur l'utilisation du formalisme de la fonction de Green coulombienne non-relativiste appliqué au calcul des termes de la série des perturbations. Plus précisément, nous avons calculé des termes d'ordres $\geqslant 2$ du développement perturbatif associé à la description de l'interaction du rayonnement électromagnétique quantifié avec un système atomique hydrogénoïde.

Dans ce chapitre, nous montrerons tout d'abord comment et sous quelles conditions on est amené à introduire ce formalisme dans un calcul de perturbation. Ensuite nous donnerons un aperçu des autres méthodes, exactes ou approchées, utilisées par d'autres auteurs pour traiter des mêmes problèmes. Puis nous passerons en revue les différentes représentations de la fonction de Green en notant leurs principales caractéristiques.

### I-1. PRESENTATION

Soit donc un système global constitué d'un atome isolé non relativiste et d'un champ électromagnétique. Si l'on ne tient pas compte de l'interaction qui existe entre ces deux sous-systèmes, on associe à l'ensemble global un hamiltonien $H_o = H_{at.} + H_{rad.}$. Dans ce travail, nous introduirons la fonction de Green associée à ce hamiltonien pour une énergie donnée E du système :

$$G_o(E) = (E - H_o)^{-1} \cdot \qquad (I.1.1)$$

Notons que si l'on considère $G_o(E)$ comme une fonction de la variable complexe E, on lui donne également le nom de résolvante

de $H_o$ (3) (4).

Si l'on tient compte de l'interaction qui existe entre le champ électromagnétique et l'atome, le système est décrit par le hamiltonien perturbé :

$$H = H_o + V \ , \qquad \text{(I-1.2)}$$

où V représente le hamiltonien d'interaction que nous expliciterons plus tard.

L'existence de l'interaction peut induire des transitions radiatives entre deux états stationnaires de $H_o$. Or il est possible, lorsque la grandeur de V est petite vis à vis de celle de $H_o$, de calculer la probabilité de transition correspondante, à l'aide de la théorie des perturbations dépendant du temps. Dans le cours de ce travail, nous serons d'ailleurs amené à préciser dans quelles limites cette démarche reste acceptable et notamment ce que signifie la notion de "grandeur relative" des hamiltoniens V et $H_o$ (voir notamment le chapitre V).

Lorsque la transition induite par la perturbation met en jeu N photons ($N \geq 1$), on est amené à évaluer des éléments de matrice de transition d'ordre supérieur ou égal à N. Ainsi pour un processus de ce type, le premier terme non nul du développement perturbatif de la probabilité de transition s'exprime en fonction de l'élément de matrice d'ordre N suivant :

$$\tau_{f/i}^{(N)} = \langle f | V \, G_o(E_i) \, V \, G_o(E_i) \ldots \, V | i \rangle \qquad \text{(I-1.3)}$$

où $|i\rangle$ et $|f\rangle$ sont les états propres initial et final de $H_o$ ; $E_i$ est l'énergie du système non perturbé dans l'état initial.

Dans cette présentation, on considère que le système non perturbé est constitué de deux sous systèmes non couplés (atome et champ). Il est donc possible dans le cadre de ce modèle, de "factoriser" dans l'expression de $\tau_{f/i}^{(N)}$ les contributions respectives de chaque sous-système. Le choix de ce modèle permet ainsi d'alléger quelque peu le formalisme, puisque la partie dépendant du seul champ électromagnétique est aisément calculable, tout au moins lorsqu'il est possible de négliger

les effets de corrélation entre les divers modes du champ. Notons que dans le cas contraire, notamment lorsque le système atomique est illuminé par une impulsion laser multimode, il est nécessaire de tenir compte des propriétés de cohérence du rayonnement (7) (8).

On est alors ramené au problème de l'évaluation d'amplitudes réduites du type général suivant :

$$\mathcal{M}^{(N)}_{f/i} = \langle \varphi_f | H_I(\vec{\varepsilon}_N, \vec{k}_N)\, G(E_{N-1})\, H_I(\vec{\varepsilon}_{N-1}, \vec{k}_{N-1}) \ldots \ldots G(E_1)\, H_I(\vec{\varepsilon}_1, \vec{k}_1) | \varphi_i \rangle \qquad \text{(I-1.4)}$$

où cette fois-ci le développement est effectué sur le seul ensemble complet des états propres stationnaires de $H_{at.}$. Les états initial et final $|\varphi_i\rangle$ et $|\varphi_f\rangle$ appartiennent à cet ensemble ; $G(E_j) = (E_j - H_{at})^{-1}$ et

$$H_I(\vec{\varepsilon}_j, \vec{k}_j) = \sum_i \vec{p}_i . \vec{\varepsilon}_j\, e^{\pm i \vec{k}_j . \vec{r}_i} \qquad \text{(I-1.5)}$$

Dans cette dernière expression, la somme sur l'indice i est étendue à l'ensemble des électrons atomiques d'impulsion $\vec{p}_i$ et de position $\vec{r}_i$ ; $\vec{\varepsilon}_j$ et $\vec{k}_j$ sont respectivement le vecteur de polarisation et le vecteur d'onde du j-ième photon mis en jeu ; le signe de l'exponentielle est choisi selon que ce photon est émis (-) ou absorbé (+).

L'élément de matrice $\mathcal{T}^{(N)}_{f/i}$ est ainsi décomposé en une somme d'amplitudes réduites $\mathcal{M}^{(N)}_{f/i}$. Cette somme comprend autant de termes qu'il existe de chemins différents permettant d'effectuer la transition $|i\rangle \rightarrow |f\rangle$.

L'interaction atome-champ

La forme (I-1.5) de $H_I$ correspond à la partie en $-\frac{e}{mc}\vec{A}.\vec{p}$ de l'opérateur d'interaction V, qui agit plus spécifiquement sur le sous-système atomique ; le terme en $\frac{e^2}{2mc^2} A^2$ n'apparaît pas. Le problème a été posé, de l'importance éventuelle de ce dernier terme dans les calculs de probabilités de transition d'ordre supérieur à deux (149). Dans le cas d'un processus à trois photons, H.F. HAMEKA (5) a pu montrer

que, si l'on se restreint à l'approximation dipolaire, le terme en $A^2$ n'apportait pas de contribution. Ce résultat a été généralisé ensuite aux processus d'ordres supérieurs par N.V. COHAN et H.F. HAMEKA (6). La démonstration repose sur des considérations simples de conservation d'énergie, reliées au fait que l'énergie du système atomique reste inchangée lors d'un processus induit par le terme en $A^2$. Comme pour l'instant, un calcul d'amplitude d'ordre supérieur à deux, qui tiendrait compte de l'effet de retard, n'a pu être envisagé, nous n'avons pas pris ce terme en considération.

Revenant à l'expression (I-1.4) de $\mathcal{M}^{(N)}_{fi}$, il convient de préciser davantage la signification et l'effet des diverses approximations qui nous ont permis d'obtenir cette forme "réduite". Ainsi que nous l'avons signalé, nous avons négligé, dans les états intermédiaires virtuels, le couplage existant entre l'atome et le champ électromagnétique. Cela nous a permis de passer de la fonction de Green $G_o(E)$ associée à $H_o$ à la fonction de Green $G(E)$ associée à $H_{at.}$. D'un point de vue plus physique, cela revient à ne pas tenir compte des effets du champ sur l'énergie des niveaux atomiques : nous travaillons dans une représentation à "niveaux non déplacés". Cette approximation ne permet une bonne description des phénomènes observés lors des processus multiphotoniques que si deux conditions sont remplies :

a) Il convient que la source lumineuse éclairant notre atome ne soit pas "très intense". Nous serons amené à préciser davantage ce point dans ce travail (Cf. chapitre V).

b) Même dans le cas des sources de faible intensité, il est nécessaire pour que l'approximation reste valable, que la fréquence du rayonnement ne soit pas voisine d'une fréquence propre caractéristique du système atomique. Dans le cas contraire, les effets liés au couplage atome-champ peuvent prendre une grande importance.

La prise en compte de ce couplage, dans la description de l'interaction d'un électron lié avec un champ électromagnétique, reste un des problèmes fondamentaux de la physique atomique

On tente habituellement de le résoudre en utilisant la représentation dite "d'interaction liée" introduite par W.H. FURRY (12). Nous renvoyons le lecteur intéressé par l'utilisation de cette représentation à l'article fondamental de F. LOW (13) sur lequel sont basés les travaux les plus récents sur la question (10)(167).

L'étude de ces effets est devenue un thème de recherche important en physique atomique : une adaptation de la théorie des perturbations à leur étude et une confrontation positive avec l'expérience serait un grand succès pour la théorie et permettrait une meilleure compréhension des processus mis en jeu. Récemment des progrès importants ont été accomplis dans cette voie : nous y reviendrons lorsque nous traiterons de l'ionisation multiphotonique;mais nous pouvons mentionner dès maintenant les articles importants de E. ARNOUS et Y. HENO (9), Y. GONTIER et M. TRAHIN (10) (167) et P. LAMBROPOULOS (11).

Dans cette représentation "à niveaux non déplacés" que nous avons utilisée,il est possible néanmoins d'obtenir des informations intéressantes sur certains des effets liés au couplage et se traduisant par un déplacement des niveaux. Ainsi nous avons pu aborder l'étude du déplacement de Lamb (Cf. chapitre III) et du déplacement par irradiation lumineuse non résonante (light-shift) : voir le chapitre V, §.7.

Le modèle atomique.

Jusqu'à présent,dans cette présentation,nous nous sommes intéressé principalement à la description du champ électromagnétique et de l'interaction de ce même champ avec un système atomique non spécifié. Or la nature de ce dernier joue, bien entendu, un rôle essentiel quant au caractère des phénomènes observés.

On se trouve alors confronté à un problème qui se pose fréquemment en physique : le choix d'un modèle théorique adapté à la description du phénomène naturel observé. L'alternative offerte au théoricien,étudiant un système atomique complexe, peut être schématisée comme suit :

a) ou bien l'on choisit une description précise du système atomique, ce qui permet d'avoir une bonne connaissance de son comportement statique. Mais on perd alors tout espoir de rendre compte avec précision des processus d'ordres élevés dans lequel ce système est impliqué (comportement dynamique).

b) ou bien l'on choisit un modèle très simplifié pour décrire le système atomique : il est alors possible, sous certaines conditions, d'effectuer un calcul exact d'amplitudes de transition d'ordres élevés.

Cette situation explique la popularité dont jouit, au sein de la communauté des physiciens théoriciens, le modèle de l'atome d'hydrogène non relativiste, pour rendre compte des processus multiphotoniques. De plus, les propriétés de symétrie du potentiel coulombien permettent de simplifier le formalisme et rendent possible un calcul analytique exact. D'autre part ainsi que nous l'avons signalé, l'utilisation de ce modèle simple permet d'interpréter, au moins qualitativement, la plupart des caractéristiques des processus d'ordres élevés. Les résultats que nous avons obtenus dans ce travail nous permettront d'étayer ces assertions.

Avant de passer succinctement en revue, les différentes méthodes employées pour calculer les sommes infinies, contenues dans l'expression d'une amplitude de transition donnée, nous allons rappeler quelques propriétés générales des fonctions de Green(x).

La fonction de Green associée à un opérateur H est l'opérateur

$$G(E) = (E - H)^{-1} \qquad \text{(I-1.6)}$$

En multipliant à droite les deux membres de cette identité par le projecteur $P_\nu = |\nu\rangle\langle\nu|$, associé à une valeur propre $E_\nu$ de H tel que:

$$H P_\nu = E_\nu P_\nu \quad , \qquad \text{(I-1.7)}$$

on obtient :

$$G(E) P_\nu = (E-H)^{-1} P_\nu = (E-E_\nu)^{-1} P_\nu \qquad \text{(I-1.8)}$$

et en tenant compte de la relation de fermeture vérifiée par les projecteurs, on a :

$$G(E) = \sum_\nu \frac{|\nu\rangle\langle\nu|}{E-E_\nu} \qquad \text{(I-1.9)}$$

---

(x) Pour plus de détails nous renvoyons le lecteur aux références (150) et (151).

où la somme est étendue à l'ensemble complet des états propres de H.

La représentation de G (E) dans l'espace des positions :

$$G(\vec{r},\vec{r}';E) = \langle \vec{r} \mid G(E) \mid \vec{r}' \rangle = \sum_{\nu} \frac{\langle \vec{r} \mid \nu \rangle \langle \nu \mid \vec{r}' \rangle}{E - E_\nu} \qquad \text{(I-1.10)}$$

est, compte tenu de (I-1.6), solution de l'équation différentielle suivante :

$$(H - E)\, G(\vec{r},\vec{r}';E) = -\delta(\vec{r} - \vec{r}') \qquad \text{(I-1.11)}$$

Notons que, dans le calcul des perturbations, la fonction de Green est introduite sous la forme du développement (I-1.10) mais que le plus souvent, c'est à partir de l'équation (I-1.11) que l'on étudie ses propriétés. En effet, c'est en travaillant sur l'équation ci-dessus (ou sur l'équation intégrale correspondante, écrite dans l'espace des impulsions) dans laquelle H est le hamiltonien de l'atome d'hydrogène, qu'ont été obtenues les représentations utilisées dans ce travail. Nous y reviendrons succinctement dans les paragraphes suivants, après avoir mentionné les autres méthodes de sommation utilisées antérieurement, dans ce type de calculs.

## I-2. METHODES DE CALCUL DES SOMMES INFINIES DE LA SERIE DES PERTURBATIONS

La difficulté essentielle, inhérente au calcul des perturbations, réside dans l'évaluation des sommes infinies étendues à l'ensemble du spectre atomique. Un exemple significatif en est donné par le calcul d'une amplitude du second ordre revêtant la forme générale :

$$T^{(2)}_{f/i} = \sum_{\nu} \frac{\langle \varphi_f \mid V' \mid \nu \rangle \langle \nu \mid V \mid \varphi_i \rangle}{E - E_\nu} \qquad \text{(I-2.1)}$$

L'approximation la plus élémentaire et la plus largement utilisée, consiste à remplacer le dénominateur $E - E_\nu$ par une constante W choisie semi-phénoménologiquement, puis à appliquer la relation de fermeture pour se ramener à un problème du premier ordre (14).

Il est possible également d'effectuer la somme terme à terme pour les états $|\nu\rangle$ appartenant au spectre discret et à

intégrer numériquement pour obtenir la contribution du continuum. Nous reviendrons sur les précautions à prendre et sur les limitations de cette procédure, lorsque nous traiterons du déplacement de Lamb des états très excités.

Un progrès considérable a été accompli en 1955 par A. DALGARNO et J.T. LEWIS (15) qui ont ramené le problème à celui de l'intégration numérique d'une équation différentielle inhomogène. L'élément de matrice du second ordre à évaluer peut s'écrire :

$$T^{(2)}_{f/i} = \langle \varphi_f | V' \, G(E) \, V | \varphi_i \rangle \; ; \; G(E) = (E - H_{at.})^{-1} \qquad \text{(I-2.2)}$$

On introduit la fonction $|\Psi\rangle = G(E) V |\varphi_i\rangle$ , (I-2.3)

qui vérifie l'équation différentielle inhomogène :

$$(E - H_{at.}) |\Psi\rangle = V |\varphi_i\rangle \qquad \text{(I-2.4)}$$

que l'on peut toujours intégrer numériquement. Une fois connue $|\Psi\rangle$, le problème initial est ramené à un calcul du premier ordre :

$$T^{(2)}_{f/i} = \langle \varphi_f | V' | \Psi \rangle \; . \qquad \text{(I-2.5)}$$

Cette méthode, qui fut à l'origine d'un grand nombre de travaux, a été généralisée par C. SCHWARTZ (16) puis appliquée au calcul du déplacement de Lamb dans l'atome d'hydrogène par C. SCHWARTZ et J.J. TIEMANN (17). Ces derniers auteurs ont spécialisé la technique, en tenant compte des particularités du potentiel coulombien. Ces travaux ayant été à la base des études les plus complètes effectuées à ce jour sur les processus multiphotoniques, nous en décrivons les caractéristiques dans l'annexe A.

W. ZERNIK, pour différents processus du second ordre, puis Y. GONTIER et M. TRAHIN, pour les processus d'ordres supérieurs, ont encore développé puis perfectionné cette méthode, lui conférant une grande fiabilité. Nous reviendrons plus en détail sur ces travaux qui nous serviront de référence et de critère de comparaison tout au long de cet exposé.

Il restait à explorer les possibilités offertes, par l'utilisation de la fonction de Green coulombienne. Bien que J. SCHWINGER en ait donné une représentation dans son cours de Mécanique Quantique à Harvard en 1947, il n'a exhumé ses

résultats "de la mort tranquille des notes de cours" qu'en 1964 (18) . En publiant cette représentation intégrale de la fonction de Green dans l'espace des impulsions, J. SCHWINGER avait été stimulé par le fait que plusieurs publications de l'époque témoignaient d'un renouveau d'intérêt pour le sujet.

Dans les paragraphes suivants, nous nous attacherons à décrire la démarche de J. SCHWINGER, car nous avons utilisé un formalisme analogue dans le calcul des transitions à 2 photons entre deux états liés (chapitre II). Puis nous considérerons également de manière succincte les travaux de L. HOSTLER (33) ( 86) qui nous ont servi dans les chapitres suivants.

## I-3. LA REPRESENTATION DE J. SCHWINGER ET LES REPRESENTATIONS EQUIVALENTES DANS L'ESPACE DES IMPULSIONS

L'équation de Schrödinger $(H_{at} - E)\varphi = o$, écrite en représentation impulsion, apparaît sous la forme d'une équation intégrale

$$\frac{1}{2}(p^2+\varkappa^2)\Phi(\vec{p}) - \frac{\alpha}{2\pi^2}\int d^3\vec{p}'\,\Phi(\vec{p}')\,\frac{1}{|\vec{p}-\vec{p}'|^2} = 0 \qquad \text{(I-3.1)}$$

où $\varkappa = (-2E)^{1/2}$ ; $(E < o)$ ;

et $\alpha = Z$ caractérise le couplage correspondant au potentiel coulombien (*).

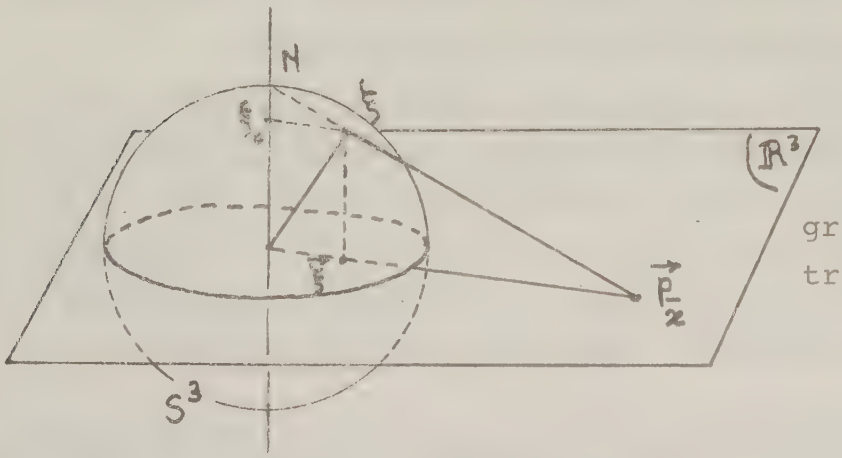
Cette équation ne révèle rien de plus a priori que l'invariance rotationnelle tridimensionnelle du système. Pourtant dès 1935, V.FOCK (19)(53) a pu montrer qu'en fait le groupe de symétrie concerné était O (4) et non pas seulement O (3). Pour cela, il a introduit la transformation qui depuis porte son nom et correspond au changement de variable suivant :

$$\vec{\xi} = -\frac{2\varkappa\vec{p}}{p^2+\varkappa^2}\,,\quad \xi_o = \frac{p^2-\varkappa^2}{p^2+\varkappa^2}\,;\quad \vec{\xi}^{\,2} + \xi_o^2 = 1 \qquad \text{(I-3.2)}$$

Le point $\xi$ de $\mathbb{R}^4$ défini par les coordonnées $(\xi_o, \vec{\xi})$ appartient

(*) Nous utilisons le système d'unités atomiques dans ce travail. Voir notamment l'annexe B.

donc à l'hypersphère unité $S^3$. On passe de $\xi$ à $\vec{p}/\varkappa$ par une projection stéréographique dont le pôle est le pôle nord N de l'hypersphère, sur son hyperplan équatorial (x).




La projection stéréographique associée à la transformation de Fock.

fig 1.1

A l'aide des formules de transformation suivantes :

$$\begin{cases} d^3\vec{p} = \left(\frac{x^2+p^2}{2x}\right)^3 d\xi \ ; \text{ (qui entraîne : } \delta(\vec{p}-\vec{p}') = \left(\frac{2x}{x^2+p^2}\right)^3 \delta(\xi-\xi')\text{)} ; \\ |\vec{p}-\vec{p}'|^2 = \frac{(x^2+p^2)(x^2+p'^2)}{4x^2} |\xi-\xi'|^2 \\ \Phi(\vec{p}) = \frac{4x^{5/2}}{(x^2+p^2)^2} Y(\xi) \end{cases} \qquad \text{(I-3.3)}$$

l'équation de Schrödinger s'écrit dans $\mathbb{R}^4$ :

$$Y(\xi) = 2\nu \int_{S^3} d\xi' Y(\xi') D(\xi-\xi') \qquad \text{(I-3.4)}$$

où : $\nu = \frac{\alpha}{x}$ et $D(\xi-\xi') = \frac{1}{4\pi^2} |\xi-\xi'|^{-2}$

Parallèlement, la fonction de Green $G(\vec{p},\vec{p}'; E)$ associée à l'équation de Schrödinger (I-3.1) est solution de l'équation :

$$\frac{1}{2}(p^2+x^2) G(\vec{p},\vec{p}'; E) - \frac{\alpha}{2\pi^2} \int d^3\vec{p}'' G(\vec{p}'',\vec{p}'; E) \frac{1}{|\vec{p}-\vec{p}''|^2} = -\delta(\vec{p}-\vec{p}') \qquad \text{(I-3.5)}$$

qui s'écrit, dans l'espace de FOCK :

$$\Gamma(\xi,\xi') = \delta(\xi-\xi') + 2\nu \int_{S^3} d\xi'' \Gamma(\xi'',\xi') D(\xi-\xi'') \qquad \text{(I-3.6)}$$

---

(x) ou encore par une inversion de pôle N et de puissance $\sqrt{2}$

où $\Gamma(\xi,\xi')$, transformée de $G(\vec{p}, \vec{p}' ; E)$, est donnée par :

$$\Gamma(\xi,\xi') = -\frac{1}{2}\frac{(x^2+p^2)^2(x^2+p'^2)^2}{(2x)^3} G(\vec{p},\vec{p}';E) \qquad \text{(I-3.7)}$$

La résolution des équations I-3.1 et I-3.5, dans l'espace des impulsions, est donc ramené à un problème d'analyse harmonique sur $S^3$ dans $\mathbb{R}^4$. Pour le résoudre, il suffit de remarquer que $D(\xi - \xi')$ connectant deux points de l'hypersphère $S^3$ est un cas particulier du noyau de Poisson $D(e\xi - e'\xi')$ connectant deux points quelconques de $\mathbb{R}^4$, dont les positions respectives $e\xi$ et $e'\xi'$ sont données en coordonnées sphériques. Ce noyau de Poisson $D(e\xi - e'\xi')$ est par définition la fonction de Green associée à l'équation de Laplace dans $\mathbb{R}^4$:

$$\Delta^4 D(e\xi - e'\xi') = -\delta(e\xi - e'\xi') \qquad \text{(I-3.8)}$$

On peut en obtenir un développement construit sur l'ensemble des harmoniques sphériques solides quadridimensionnelles, solutions de l'équation de Laplace :

$$\left\{ e^{n-1} Y_{nlm}(\xi), e<1 \; ; \; e^{-n-1} Y_{nlm}(\xi), e>1 \right\}$$

où $Y_{nlm}(\xi)$ est une harmonique sphérique de surface normalisée à l'unité (26). On obtient alors :

$$D(e\xi - e'\xi') = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{2n} \frac{e_<^{n-1}}{e_>^{n+1}} \sum_{l,m} Y_{nlm}(\xi) Y^*_{nlm}(\xi') \; ; \; e_> = \sup_{\text{inf.}}(e,e') \qquad \text{(I-3.9)}$$

Compte tenu de ce résultat, spécialisé pour le cas particulier $e = e' = 1$ et en tenant compte de la relation de fermeture $\sum_{nlm} Y_{nlm}(\xi) Y^*_{nlm}(\xi') = \delta(\xi - \xi')$ on vérifie aisément que :

$$Y_{nlm}(\xi) = 2n \int_{S^3} d\xi' \, Y_{nlm}(\xi') D(\xi - \xi') \qquad \text{(I-3.10)}$$

et

$$\Gamma(\xi,\xi') = \sum_{nlm} \left(1 - \frac{\nu}{n}\right)^{-1} Y_{nlm}(\xi) Y^*_{nlm}(\xi') \qquad \text{(I-3.11)}$$

Une des propriétés remarquables de cette expression de la fonction de Green, est que la somme infinie n'est étendue que sur un spectre discret. Cette caractéristique est liée à la nature de la transformation de Fock qui particularise l'énergie du système,

considérée alors comme fixée et entrant dans la définition du paramètre $\varkappa = \sqrt{-2E}$. Comme on peut s'en rendre compte en comparant les équations I-3.4 et I-3.10, le problème aux valeurs propres de l'énergie peut être transformé en un problème "conjugué" de valeurs propres de la constante de couplage $\alpha$. On obtient pour cette constante une valeur quantifiée $\alpha_n = n\,x$, pour laquelle il pourrait exister un état lié d'énergie $E = -\frac{x^2}{2}$. Cette propriété de la transformation de FOCK a été mise en évidence et étudiée de manière approfondie du point de vue de la théorie des groupes, par A. DECOSTER (27) en 1970. Cependant cet auteur n'a pas mentionné la relation étroite qui existe entre l'approche de Fock et les fonctions "sturmiennes" $Y_{n\ell m}(\xi)$ solutions de l'équation"conjuguée" (I-3.10) : on peut dire que l'expression (I-3.11) de la fonction de Green $\Gamma(\xi,\xi')$ est un développement en série sur l'ensemble complet des fonctions $Y_{n\ell m}(\xi)$ (28). L'article de M. ROTENBERG (29), qui en 1952 avait montré l'intérêt de l'introduction de ce type de fonctions dans le traitement du problème à trois corps, a attiré l'attention sur les possibilités de cette technique. Nous l'avons utilisée dans ce travail et nous y reviendrons lorsque nous traiterons des représentations sturmiennes de la fonction de Green dans l'espace des positions.

Pour en revenir aux travaux de Schwinger, celui-ci a obtenu, à partir du développement (I-3.11), une représentation intégrale de $\Gamma(\xi,\xi')$ en remarquant que (astuce !) :

$$\left(1-\frac{\nu}{n}\right)^{-1} = 1+\frac{\nu}{n}+\frac{\nu^2}{n(n-\nu)} \quad \text{et} \quad (n-\nu)^{-1} = \int_0^1 dz\, z^{-\nu} z^{n-1} \qquad (\nu<1) \tag{I-3.12}$$

d'où, en utilisant la relation de fermeture et le développement (I-3.9) :

$$\Gamma(\xi,\xi') = \delta(\xi-\xi') + 2\nu D(\xi-\xi') + 2\nu^2 \int_0^1 dz\, z^{-\nu} D(\xi - z\xi') \tag{I-3.13}$$

Par intégrations partielles successives, on peut alors obtenir d'autres représentations et en utilisant les formules de transformations (I-3.7) et (I-3.3), il est aisé de revenir dans l'espace des impulsions. Les représentations ainsi obtenues dans l'espace des impulsions ont été largement utilisées notamment par M. GAVRILA.

Nous mentionnerons pour mémoire les travaux de S. OKUBO et D. FELDMAN (30) qui en 1960 ont obtenu une représentation intégrale de G ($\vec{p}$, $\vec{p}'$ ; E) dont l'équivalence avec la forme obtenue par J. SCHWINGER n'a été prouvée qu'en 1971 par J.C.Y. CHEN (31). De nombreux auteurs se sont intéressés directement ou indirectement (en étudiant les propriétés de la matrice T coulombienne pour le problème à 2 corps) à la fonction de Green coulombienne. Nous renvoyons le lecteur intéressé, au récent article de revue de J.C.Y. CHEN et A.C. CHEN (32) qui contient une abondante bibliographie sur G ($\vec{p}$, $\vec{p}'$ ; E)..

## I-4. REPRESENTATION INTEGRALE DE L. HOSTLER (33)

L. HOSTLER (33) a utilisé tout d'abord le fait que la fonction de Green associée à une équation de Schrödinger pour un potentiel central, peut être donnée sous la forme d'un développement en ondes partielles :

$$G(\vec{r},\vec{r}';E) = \frac{1}{4\pi} \sum_{\ell=0}^{\infty} (2\ell+1) P_\ell(\cos\theta)\, G_\ell(r,r';E) \qquad \text{(I-4.1)}$$

où $\theta = (\vec{r}, \vec{r}')$.

On est alors ramené à l'étude de la fonction de Green radiale $G_\ell$ (r,r' ; E), solution de l'équation différentielle inhomogène :

$$(H_\ell - E)\, G_\ell(r,r';E) = -\delta(r-r') \qquad \text{(I-4.2)}$$

associée à l'équation de Schrödinger radiale

$$(H_\ell - E)\, R_{n,\ell}(r) = 0 \qquad \text{(I-4.3)}$$

où

$$H_\ell = -\left[ \frac{1}{2}\frac{d^2}{dr^2} + \frac{1}{r}\frac{d}{dr} + \frac{1}{r} - \frac{\ell(\ell+1)}{r^2} \right] \qquad \text{(I-4.4)}$$

dans le cas de l'atome d'hydrogène.

Un théorème connu de la théorie générale des fonctions de Green montre que $G_\ell(r,r';E)$ peut s'exprimer en fonction des solutions indépendantes de l'équation homogène correspondante

(I-4.3). Voir par exemple les références (150) § 7.2 et (151) vol. II § 15.15.

L'application de ce théorème au cas de l'atome d'hydrogène donne le résultat suivant :

$$G_\ell(r,r';E) = -\frac{\Gamma(\ell+1-\frac{1}{x})}{x\, rr'} M_{\frac{1}{x},\ell+\frac{1}{2}}(2r_<x)\, W_{\frac{1}{x},\ell+\frac{1}{2}}(2r_>x) \qquad \text{(I-4.5)}$$

où $r_{><} = \underset{\text{inf.}}{\text{Sup.}}(r,r')$ et où les fonctions de Whittaker (20), (34), $M$ et $W$ sont, à un facteur de normalisation près, les solutions régulières respectivement à l'origine et à l'infini, de l'équation homogène (I-4.3).

Cette forme de $G_\ell$ avait été donnée auparavant par R.A. MAPLETON (35) mais L. HOSTLER est allé plus loin. Utilisant une représentation intégrale de ce produit de deux fonctions de Whittaker (réf. 34, p. 86) il a obtenu l'expression suivante :

$$G_\ell(r,r';E) = -2(rr')^{-1/2}\int_0^\infty dt\, e^{-(r+r')x\,\mathrm{ch}t}\,(\coth\tfrac{t}{2})^{2/x}\, I_{2\ell+1}(2x\sqrt{rr'}\,\mathrm{sh}t) \qquad \text{(I-4.6)}$$

où $I_\lambda(z)$ est la fonction de Bessel d'argument imaginaire. L. HOSTLER a transformé cette intégrale réelle en une intégrale dans le plan complexe. Puis l'insérant dans l'expression globale (I-4.1) il a pu sommer exactement le développement en ondes partielles, obtenant :

$$G(\vec{r},\vec{r}';E) = \frac{x}{4\pi}\,\frac{e^{-\pi/x}}{\mathrm{sh}(\frac{\pi}{x})}\int_{+\infty}^{(1+)} ds\,\left(\frac{s+1}{s-1}\right)^{i/x} e^{x(r+r')s}\, I_0\left[-2x(rr')^{1/2}\cos\tfrac{\theta}{2}(s^2-1)^{1/2}\right] \qquad \text{(I-4.7)}$$

où $\theta = (\vec{r},\vec{r}')$

Cette partie des travaux de HOSTLER a été exploitée par de nombreux auteurs pour le calcul des amplitudes de transition de divers processus à deux photons. Nous y reviendrons lorsque nous traiterons de ces différents effets. Remarquons au passage que la forme (I-4.7) contient la dépendance angulaire de la fonction de Green $G(\vec{r},\vec{r}';E)$ sous une forme implicite.

Elle peut donc être utilisée pour des calculs tenant compte de l'effet de retard. Ceci a été fait notamment par S. KLARSFELD (36).

Par contre, dans le cas d'un calcul effectué sous l'approximation dipolaire, il est plus avantageux d'utiliser directement(I-4.6). Nous le montrerons dans le chapitre III traitant du calcul de la partie non relativiste du déplacement de Lamb (37).

Pour en terminer avec ce type de représentations, signalons que L. HOSTLER, prenant la transformée de Fourier de la fonction de Green sous la forme (I-4.7), en a donné une représentation dans l'espace des impulsions (38). L'équivalence de cette dernière avec la représentation de SCHWINGER (18) a été montrée dans la référence (32). Citons encore les travaux de H.F. HAMEKA (39) qui a donné une expression de $G_\ell$ analogue à l'expression (I-4.5), mais n'a pas cherché à l'améliorer en vue d'utilisations éventuelles.

Enfin,nous mentionnerons l'article plus récent de S.I. VETCHINKIN et V.L. BACHRACH (40) qui ont étudié les fonctions de Green associées à certains systèmes simples. Ces auteurs ont donné, pour différents potentiels utilisés en physique atomique et moléculaire, des représentations analogues aux expressions (I-4.5) et (I-4.6).

## I-5. REPRESENTATION STURMIENNE DE LA FONCTION DE GREEN DANS L'ESPACE DES POSITIONS

En dehors de l'expression (I-3.11) définie dans l'espace de Fock, les représentations mentionnées ci-dessus sont données sous forme intégrale. Comme nous l'avons signalé et comme nous le constaterons, elles sont d'un emploi commode pour l'étude des processus du second ordre,car dans l'amplitude correspondante il n'apparaît qu'une fonction de Green. Par contre, pour les phénomènes d'ordre supérieur, la présence d'intégrales multiples entraîne des complications inextricables. Nous avons donc utilisé un autre type de représentation basé sur le développement de la fonction de Green sur l'ensemble des fonctions propres "sturmiennes" coulombiennes. Avant d'expliciter ce développement, nous rappelons quelques propriétés générales de ces fonctions.

A l'équation aux valeurs propres de Schrödinger, réduite à sa partie radiale :

$$-\frac{1}{2}\left(\frac{d^2}{dr^2}+\frac{2}{r}\frac{d}{dr}-2\alpha V(r)+\frac{\ell(\ell+1)}{r^2}\right)R_{n,\ell}(r)=E_n\,R_{n,\ell}(r) \qquad \text{(I-5.1)}$$

où $\alpha$ est la constante de couplage, on associe l'équation sturmienne :

$$-\frac{1}{2}\left(\frac{d^2}{dr^2}+\frac{2}{r}\frac{d}{dr}+2E-\frac{\ell(\ell+1)}{r^2}\right)S_{n,\ell,E}(r)=-\alpha_{n\ell E}\,V(r)\,S_{n,\ell,E}(r) \qquad \text{(I-5.2)}$$

$$S_{n\ell E}(0)\to 0 \quad ; \quad S_{n\ell E}(\infty)\to 0 \qquad \text{(I-5.3)}$$

Comme nous l'avions signalé plus haut, le problème des valeurs propres de l'énergie totale, pour une constante de couplage donnée, est transformé en un problème de valeurs propres de la constante de couplage, pour une énergie totale $E<0$ et un moment angulaire donnés.

Posant $H'_\ell=-\frac{1}{2}\left[\frac{d^2}{dr^2}+\frac{2}{r}\frac{d}{dr}-\frac{\ell(\ell+1)}{r^2}\right]$ et remarquant que $H'_\ell$ et V sont des opérateurs hermitiens, on vérifie que les fonctions $S_{n,\ell,E}(r)=|n,\ell,E\rangle$ appartiennent à un ensemble complet de fonctions orthogonales telles que :

$$\langle n',\ell,E|H'_\ell-E|n,\ell,E\rangle=-\alpha_{n\ell E}\langle n',\ell,E|V|n,\ell,E\rangle=-\alpha_{n'\ell E}\langle n',\ell,E|V|n,\ell,E\rangle \qquad \text{(I-5.4)}$$

ce qui entraine la relation d'orthonormalisation suivante :

$$\langle n',\ell,E|V|n,\ell,E\rangle=-\delta_{n,n'}, \qquad \text{(I-5.5)}$$

Le choix du signe - correspondant à un potentiel attractif ($V<0$). On peut alors en déduire la relation de fermeture :

$$\sum_{n'}|n',\ell,E\rangle\langle n,\ell,E|\,V=-1 \qquad \text{(I-5.6)}$$

Dans le cas particulier du potentiel coulombien attractif : $V=-\frac{1}{r}$. Si l'on tient compte des conditions aux limites (I-5.3) on obtient alors :

a) La quantification de la constante de couplage :

$$\alpha_{n\ell E}=n\varkappa \; ; \; \varkappa=\sqrt{-2E} \; ; \; n=1,2,\ldots$$

b) La forme générale des fonctions $S^c_{n,\ell,E}(r)$ :

$$S^c_{n,\ell,E}(r) = N_{n\ell}\, e^{-\varkappa r}\, r^{\ell}\, {}_1F_1(\ell+1-n;\, 2\ell+2;\, 2\varkappa r) \qquad \text{(I-5.8)}$$

La constante de normalisation $N_{n\ell}$ est obtenue à partir de la relation d'orthogonalité ( I-5.5) en calculant une intégrale portant sur le produit de deux fonctions hypergéométiques confluentes. On a explicitement :

$$N_{n\ell} = \frac{(2\varkappa)^{\ell+1}}{(2\ell+1)!}\sqrt{\frac{(n+\ell)!}{(n-\ell-1)!}} \qquad \text{(I-5.9)}$$

On peut développer la fonction de Green, pour une énergie E donnée, sur l'ensemble complet des fonctions $|n,\ell,E\rangle$ :

$$G_\ell(E) = (E - H'_\ell - \frac{1}{r})^{-1} = \sum_{n=\ell+1}^{\infty} a(n,E)\, |n,\ell,E\rangle\langle n,\ell,E| \qquad \text{(I-5.10)}$$

Or nous avons, d'après (I-5.2)

$$(H'_\ell - E)\,|n,\ell,E\rangle = -\alpha_{n\ell E}\,\frac{1}{r}\,|n,\ell,E\rangle \qquad \text{(I-5.11)}$$

et d'après (I-5.10) :

$$(E - H'_\ell + \frac{1}{r})\sum_{n=\ell+1}^{\infty} a(n,E)\,|n,\ell,E\rangle\langle n,\ell,E| = I \qquad \text{(I-5.12)}$$

En comparant ces deux relations et en appliquant la relation de fermeture (I-5.6) on obtient :

$$a(n,E) = (1-\alpha_{n\ell E})^{-1}$$

d'où

$$G_\ell(r,r';E) = \sum_{n=\ell+1}^{\infty} \frac{S^{c*}_{n,\ell,E}(r)\, S^c_{n,\ell,E}(r')}{1-n\varkappa} \qquad \text{(I-5.13)}$$

Remplaçant les fonctions coulombiennes $S^c_{n,\ell,E}(r)$ par leur expression (I-5.8), on a finalement la représentation dite "sturmienne" :

$$G_\ell(r,r';E) = -\frac{2^{2\ell+2}\,\varkappa^{2\ell+1}}{[(2\ell+1)!]^2}\, e^{-\varkappa(r+r')}\,(rr')^{\ell}\sum_{n=\ell+1}^{\infty}(n-\tfrac{1}{2})^{-1}\,\frac{(n+\ell)!}{(n-\ell-1)!}\cdots$$

$$\cdots\, {}_1F_1(\ell+1-n;\, 2\ell+2;\, 2\varkappa r)\, {}_1F_1(\ell+1-n;\, 2\ell+2;\, 2\varkappa r') \qquad \text{(I-5.14)}$$

Ce résultat a été donné pour la première fois par L. HOSTLER en 1970 (86). Bien entendu, il est possible d'effectuer le même raisonnement dans l'espace des impulsions (32) : on obtient alors une expression correspondant à la forme (I-3.11)

donnée par J. SCHWINGER.

Malgré l'intérêt qu'il présente, ce type de représentation semble avoir été peu utilisé à ce jour : nous y reviendrons lorsque nous traiterons des processus mettant en jeu plus de deux photons. Signalons cependant que seules les méthodes "sturmiennes" semblent ouvrir de réelles possibilités pour obtenir une généralisation relativiste de la fonction de Green coulombienne (87).

# PREMIERE PARTIE

## PROCESSUS A DEUX PHOTONS

### INTRODUCTION

La division de cet exposé en deux parties reflète la chronologie de notre travail. Lorsque nous avons entrepris cette étude, en 1971, le formalisme de la fonction de Green coulombienne avait été appliqué avec succès au calcul de diverses amplitudes du second ordre. Néanmoins deux problèmes nous ont paru susceptibles de recevoir des solutions plus élégantes que celles proposées antérieurement.

Le premier concernait la prise en compte de l'effet de retard dans l'évaluation des amplitudes du second ordre. Les techniques proposées menaient à des calculs particulièrement pesants. Nous avons donc pensé les alléger notablement en utilisant la représentation de Schwinger donnée dans $\mathbb{R}^4$ (chapitre II).

Le second avait pour objet l'évaluation de la contribution non relativiste du graphe de self énergie au déplacement de Lamb. La nécessité d'intégrer sur l'énergie du photon virtuel obligeait à recourir à des techniques purement numériques. L'utilisation de la représentation intégrale de L. HOSTLER nous a permis d'effectuer le calcul presqu'entièrement analytiquement. Par cette méthode nous avons obtenu le "logarithme de Bethe" avec une grande précision pour les états $1S$ à $4P$ (chapitre III).

# CHAPITRE II

## TRANSITIONS RADIATIVES A DEUX PHOTONS ENTRE DEUX ETATS LIES DE L'ATOME D'HYDROGENE . EFFET DE RETARD.

### II-1. POSITION DU PROBLEME

Lorsque nous nous sommes intéressé aux transitions radiatives à plusieurs photons, nous avions principalement en vue l'étude de la diffusion de la lumière par un atome, c'est-à-dire l'étude de processus du second ordre tels que la diffusion élastique ou diffusion Rayleigh, la diffusion Compton sur électron lié, voire l'effet Raman. L'utilité de l'emploi de la fonction de Green coulombienne pour le calcul analytique des amplitudes de transition correspondantes avait été démontré dès 1967 par M. GAVRILA (41) dans le cas particulier de la diffusion élastique par un atome d'hydrogène dans l'état fondamental. Le calcul était effectué dans l'espace des impulsions en utilisant une représentation de la fonction de Green G $(\vec{p}_2, \vec{p}_1, W)$ obtenue à partir de l'expression (I-3.11) donnée par J. SCHWINGER (18).

Ce travail de précurseur avait été rapidement étendu à l'étude de divers processus du second ordre par plusieurs auteurs qui, curieusement, avaient préféré travailler dans l'espace des positions à l'aide des représentations de HOSTLER ( I-4.6) ou(I-4.7 ), peut-être à cause des difficultés rencontrées pour généraliser la méthode de M. GAVRILA. Nous mentionnerons les articles successifs de l'équipe de B.A. ZON et L.P. RAPOPORT sur la désexcitation par émission de deux photons de l'état métastable 2S de l'atome d'hydrogène (42) puis sur les transitions à deux photons entre deux états liés (43) et sur l'ionisation par deux photons de l'atome dans l'état fondamental (44).

Tous les calculs mentionnés ci-dessus étaient effectués dans les limites de l'approximation dipolaire. Cette restriction fut levée pour ces mêmes processus par S. KLARSFELD (36) en 1969(*).

---

(*) Comme nous l'avions noté dans le paragraphe (I-4) cet auteur avait utilisé la représentation (I-4.6)donnée par Hostler.

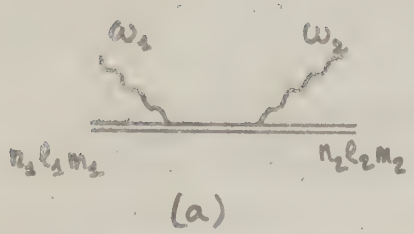
M. GAVRILA à son tour a inclu l'effet de retard dans l'étude de la diffusion élastique (45) puis inélastique (46) (effet Compton sur électron K). Dans le même domaine, nous mentionnerons aussi les travaux de V.G. GORSHKOV et V.S.POLIKANOV (47) qui ont utilisé le formalisme de HOSTLER pour étudier la diffusion inélastique, et ceux de C. FRONSDAL (48) qui a mis au point une technique algébrique très élaborée basée sur les propriétés de symétrie de l'atome d'hydrogène.

Il faut souligner cependant que, sauf dans le résultat obtenu par M. GAVRILA pour la diffusion élastique (45), les expressions des amplitudes de transition contiennent encore des opérateurs différentiels agissant sur des fonctions hypergéométriques à plusieurs variables. Cette circonstance ne facilite évidemment pas l'utilisation ultérieure de ces résultats en vue de calculs numériques. Nous avons alors espéré obtenir des formules explicites directement exploitables en travaillant dans $\mathbb{R}^4$; pour cela nous avons utilisé un formalisme quadridimensionnel basé sur la transformation de FOCK et mis au point dans notre groupe par J.P. GAZEAU (49).

Plus explicitement, notre motivation reposait sur la constatation du fait que les calculs analytiques de M. GAVRILA (41) (45) (46) apparaissent comme particulièrement longs et délicats. La raison en est que le calcul utilise la représentation de J. SCHWINGER dans l'espace des impulsions alors que cette représentation a été établie à l'aide de la transformation de Fock. Il nous a semblé que le fait de revenir dans l'espace des impulsions empêchait de profiter pleinement des propriétés de symétrie du système mises en évidence par cette transformation. En conséquence, dans le calcul de l'amplitude de diffusion, nous avons tiré avantage de ces propriétés de symétrie en utilisant la transformation de Fock.

Dans ce qui suit, nous établirons tout d'abord, en suivant la méthode indiquée, l'expression générale de l'amplitude de transition entre deux états liés, la spécialisant ensuite aux cas particuliers de la diffusion élastique sur l'état fondamental et de la transition Raman $1S \rightarrow 2S$.

## II-2. L'AMPLITUDE DE TRANSITION EXPRIMEE DANS L'ESPACE DE FOCK



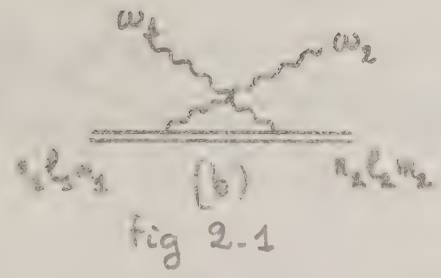




fig 2.1

Nous considérons le processus du second ordre correspondant au diagramme (a) ci-contre décrivant une transition Raman entre deux états liés $|i\rangle = |n_1 \ell_1 m_1\rangle$ et $|f\rangle = |n_2 \ell_2 m_2\rangle$, consécutive à l'absorbtion d'un photon d'énergie $\omega_1$ et à l'émission d'un photon d'énergie $\omega_2$ (*). Nous ne décrirons pas le calcul correspondant au graphe symétrique (b), la procédure étant exactement semblable et ne présentant pas d'intérêt propre. Les photons sont caractérisés respectivement par leur vecteur impulsion $\vec{k}_i$ et leur vecteur polarisation $\vec{\varepsilon}_i$, tels que $\vec{k}_i . \vec{\varepsilon}_i = 0 (i=1,2)$ (condition de transversalité) et $\vec{k}_i = |\vec{k}_i| = \frac{\omega_i}{c}$. La relation de conservation de l'énergie s'écrit :

$$E_{n_1} + \omega_1 = E_{n_2} + \omega_2 \qquad \text{(II-2.1)}$$

Dans l'espace des positions l'amplitude de transition est de la forme :

$$T^{(2)}_{n_2/n_1}(\omega_1,\omega_2) = \langle n_2 \ell_2 m_2 | \vec{p}_2 . \vec{\varepsilon}_2 \, e^{-i\vec{k}_2 . \vec{r}_2} \, G(\vec{r}_2, \vec{r}_1 ; E_{n_1}+\omega_1) \, \vec{p}_1 . \vec{\varepsilon}_1 \, e^{i\vec{k}_1 . \vec{r}_1} | n_1 \ell_1 m_1 \rangle \qquad \text{(II-2.2)}$$

En prenant les transformées de Fourier des fonctions ondes on obtient, dans l'espace des impulsions :

$$T^{(2)}_{n_2/n_1}(\omega_1,\omega_2) = \iint d\vec{p}_2 \, d\vec{p}_2 \, \Phi^{*}_{n_2 \ell_2 m_2}(\vec{p}_2 - \vec{k}_2) \, \vec{p}_2 . \vec{\varepsilon}_2 \, G(\vec{p}_2, \vec{p}_1 ; E_{n_1}+\omega_1) \, \vec{p}_1 . \vec{\varepsilon}_1 \, \Phi_{n_1 \ell_1 m_1}(\vec{p}_1 - \vec{k}_1) \qquad \text{(II-2.3)}$$

Après avoir posé, comme au paragraphe I-3 : $\lambda = Z$ $\varkappa = \sqrt{-2(E_{n_1}+\omega_1)}$ où $(E_{n_1}+\omega_1) < 0$, on passe dans l'espace de Fock en utilisant les formules de transformations (I-3.2) (I-3.3) et (I-3.7).

On obtient successivement :

---

(*) Rappelons que dans ce travail nous avons utilisé le système d'unités atomiques (voir l'annexe B).

$$G(\vec{p}_2,\vec{p}_1;E_{n_1}+\omega_1) = -2^4\frac{x^3}{(x^2+p_1^2)^2(x^2+p_2^2)^2}\,\Gamma(\xi_2,\xi_1) \qquad \text{(II-2.4)}$$

$$\left\{\begin{array}{l}
\text{où : } \xi_i = (\xi_{i0},\vec{\xi}_i) = \left[\dfrac{x^2-p_i^2}{x^2+p_i^2}\,,\ \dfrac{2x\vec{p}_i}{x^2+p_i^2}\right] ; \\[2ex]
d\vec{p}_i = \left(\dfrac{x^2+p_i^2}{2x}\right)^3 d\xi_i \ ;\ \vec{p}_i\cdot\vec{\varepsilon}_i = \left(\dfrac{x^2+p_i^2}{2x}\right)\vec{\xi}_i\cdot\vec{\varepsilon}_i ; \\[2ex]
\Phi_{n_i\ell_i m_i}(\vec{p}_i-\vec{k}_i) = \dfrac{4p_{ni}^{5/2}}{\left[p_{ni}^2+(\vec{p}_i-\vec{k}_i)^2\right]^2}\,Y_{n_i\ell_i m_i}(\xi_{ni,\vec{k}_i}) \qquad \text{(II-2.5)} \\[2ex]
\text{où : } p_{ni} = \sqrt{-2E_{ni}} = \dfrac{\lambda}{n_i} ;\ \xi_{ni,\vec{k}_i} = \left(\xi_{(n_i,\vec{k}_i)_0},\ \vec{\xi}_{n_i,\vec{k}_i}\right) = \left[\dfrac{p_{ni}^2-(\vec{p}_i-\vec{k}_i)^2}{p_{ni}^2+(\vec{p}_i-\vec{k}_i)^2}\,,\ \dfrac{2p_{ni}(\vec{p}_i-\vec{k}_i)}{p_{ni}^2+(p_i-k_i)^2}\right]
\end{array}\right.$$

L'amplitude devient :

$$T^{(2)}_{n_2/n_1}(\omega_1,\omega_2) = \frac{(x^2+p_1^2)^2(x^2+p_2^2)^2}{x^5}(p_{n_1}p_{n_2})^{5/2}\iint_{S^3\times S^3} d\xi_1\,d\xi_2\,Y^{*}_{n_2\ell_2 m_2}(\xi_{n_2,\vec{k}_2}) \qquad \text{(II-2.6)}$$

$$\times\,\vec{\xi}_2\cdot\vec{\varepsilon}_2\left[p_{n_2}^2+(\vec{p}_2-\vec{k}_2)^2\right]^{-2}\Gamma(\xi_2,\xi_1)\left[p_{n_1}^2+(\vec{p}_1-\vec{k}_1)^2\right]^{-2}\vec{\xi}_1\cdot\vec{\varepsilon}_1\,Y_{n_1\ell_1 m_1}(\xi_{n_1,\vec{k}_1})$$

Pour pouvoir effectuer les intégrations sur $S^3$ il reste à exprimer respectivement le propagateur $\left[p_{ni}^2+(\vec{p}_i-\vec{k}_i)^2\right]^{-1}$ et les variables $\xi_{n_i,\vec{k}_i}$ en fonction des variables d'intégration $\xi_i$. La démarche élémentaire consistant à faire apparaître les $\xi_i$ à l'aide de transformations algébriques se révélant d'une application longue et délicate, nous avons préféré utiliser l'élégant formalisme quaternionien mis au point par J.P. GAZEAU (49). Dans le paragraphe suivant nous introduirons ce formalisme et les formules de transformations cherchées.

## II-3 INTRODUCTION DU FORMALISME QUATERNIONIEN

Le couple P = $(x, \vec{p})$ peut être considéré comme un

élément du corps non commutatif Q des quaternions à coefficients réels (notation scalaire-vecteur) muni respectivement d'une norme $|P| = (x^2 + p^2)^{1/2}$, d'une loi multiplicative telle que $P\,Q = (x, \vec{p})\,(q_o, \vec{q}) = (xq_o - \vec{p}.\vec{q},\ x\vec{q} + q_o\vec{p} + \vec{p}\wedge\vec{q})$ d'un élément unité $I = (1, o)$ et d'un inverse $P^{-1} = \bar{P}\,|P|^{-2}$ pour cette même loi, où $\bar{P} = (x, -\vec{p})$.

A la transformation de Fock dans $\mathbb{R}^4$ correspond la projection stéréographique $\Xi_+$ des éléments de Q sur $\Omega$, sous groupe multiplicatif des quaternions de module unité, isomorphe à $S^3$ dans $\mathbb{R}^4$ :

$$P = (x, \vec{p}) \xrightarrow{\Xi_+} \xi = \Xi_+ P = P\,\bar{P}^{-1} = P^2\,|P|^{-2} \qquad \text{(II-3.1)}$$

L'utilité de l'emploi de cet algèbre des quaternions apparaît immédiatement si l'on note que la distance

$$|P - Q|^2 = |x - q_o, \vec{p} - \vec{q}|^2 = (x - q_o)^2 + (\vec{p} - \vec{q})^2 \qquad \text{(II-3.2)}$$

s'exprime simplement à l'aide de $\xi$, projeté stéréographique de P :

$$|P-Q|^2 = |P|^2\,|Q^{-1} - P^{-1}|^2|Q|^2 = (4x^2)^{-1}\,|e_x - \xi|^2\,|P|^2|Q|^2 \qquad \text{(II-3.3)}$$

où $e_x = 2x\,Q|Q|^{-2} - I$ est un quaternion de module

$$e = \left[\frac{(2x - q_o)^2 + q^2}{q_o^2 + q^2}\right]^{1/2}$$

Donc le propagateur $\left[(\vec{p}_i - \vec{k}_i)^2 + p_{n_i}^2\right]^{-1}$ peut s'exprimer à l'aide de la distance entre deux quaternions $P_i$ et $K_{n_i}$ choisis tels que leurs parties vectorielles soient respectivement $\vec{p}_i$ et $\vec{k}_i$ et que la différence de leurs parties scalaires soit égale à $p_{n_i}$ :

$$P_i = (x, \vec{p}_i)$$
$$K_{n_i} = (x + p_{n_i}, \vec{k}_i) \qquad \text{(II-3.4)}$$

$$|\bar{K}_{n_i} - \bar{P}_i|^2 = |K_{n_i} - P_i|^2 = |p_{n_i}, \vec{p}_i - \vec{k}_i|^2 = p_{n_i}^2 + (\vec{p}_i - \vec{k}_i)^2$$

Appliquant les relations définies ci-dessus on obtient aisément l'expression du propagateur :

$$\left[p_{n_i}^2 + (\vec{p}_i - \vec{k}_i)^2\right]^{-1} = \frac{4x^2}{|P_i|^2\,|K_{n_i}|^2}\,|e_{n_i} x_{n_i} - \xi_i|^{-2} \qquad \text{(II-3.5)}$$

où $$e_{n_i} \varkappa_{n_i} = \left[ (e_{n_i} \varkappa_{n_i})_0 , e_{n_i} \vec{\varkappa}_{n_i} \right] = 2\varkappa K_{n_i} |K_{n_i}|^{-2} - I \qquad \text{(II-3.6)}$$

avec : $$\begin{cases} 1 + (e_{n_i} \varkappa_{n_i})_0 = 2\varkappa (\varkappa + p_{n_i}) |K_{n_i}|^{-2} \\ e_{n_i} \vec{\varkappa}_{n_i} = 2\varkappa \vec{k}_i |K_{n_i}|^{-2} \\ e_{n_i}^2 = \left[ (\varkappa - p_{n_i})^2 + k^2 \right] |K_{n_i}|^{-2} \end{cases} \qquad \text{(II-3.7)}$$

Compte tenu de ces résultats l'amplitude cherchée devient :

$$\Gamma^{(2)}_{n_2/n_1}(\omega_1, \omega_2) = C_{n_1 n_2} \iint_{S^3 \times S^3} d\xi_1 \, d\xi_2 \, Y_{n_2 l_2 m_2}(\xi_{n_2} \vec{k}_2) \vec{\xi}_2 \cdot \vec{\varepsilon}_2 |e_{n_2} \varkappa_{n_2} - \xi_2|^{-4} \Gamma(\xi_2, \xi_1) \times |e_{n_1} \varkappa_{n_1} - \xi_1|^{-4} \vec{\xi}_1 \cdot \vec{\varepsilon}_1 \, Y_{n_1 l_1 m_1}(\xi_{n_1} \vec{k}_1)$$

où : $$C_{n_1 n_2} = 2^8 \varkappa^3 |K_{n_1} K_{n_2}| (p_{n_1} p_{n_2})^{5/2} \qquad \text{(II-3.8)}$$

L'expression de $\xi_{n_i} \vec{k}_i$ en fonction de la variable d'intégration correspondante $\xi_i$ s'obtient aisément à partir des relation (II-3.7) et de la définition (II-2.6) :

$$\xi_{n_i, \vec{k}_i} = \boxed{\Gamma}_+ (p_{n_i}, \vec{p}_i - \vec{k}_i) = \boxed{\Gamma}_+ (\overline{K}_{n_i} - \overline{P}_i) \qquad \text{(II-3.9)}$$

et : $$\overline{\xi}_{n_i, \vec{k}_i} = \frac{2\nu}{n_i} |e_{n_i} \varkappa_{n_i} - \xi_i|^{-2} \left\{ (1 + \xi_{i0})(1 + e_{n_i} \varkappa_{n_i}) - \frac{n_i}{n_i + \nu} \left[ 1 + (e_{n_i} \varkappa_{n_i})_0 \right] (1 + \xi_i) \right\} - I \qquad \text{(II-3.10)}$$

Les harmonique sphériques quadridimensionnelles $Y_{n_i l_i m_i}(\xi_{n_i} \vec{k}_i)$ sont des polynômes homogènes de degré $n_i - 1$ en $\xi_{n_i, \vec{k}_i}$. Or la relation (II-3.9) montre que $\xi_{n_i, \vec{k}_i}$ s'exprime sous la forme d'une combinaison linéaire des fonctions de $\xi_i$ suivantes : $|e_{n_i} \varkappa_{n_i} - \xi_i|^{-2}$ d'une part et $\xi_i |e_{n_i} \varkappa_{n_i} - \xi_i|^{-2}$ d'autre part. Après l'insertion des $Y_{n_i l_i m_i}(\xi_{n_i} \vec{k}_i)$ dans l'intégrant de (II-3.8) on est conduit à y remplacer les facteurs $Y_{n_i l_i m_i}(\xi_{n_i, \vec{k}_i}) |e_{n_i} \varkappa_{n_i} - \xi_i|^{-4}$ par une expression polynomiale en $|e_{n_i} \varkappa_{n_i} - \xi_i|^{-2q}$ et $\xi_i |e_{n_i} \varkappa_{n_i} - \xi_i|^{-2q}$ avec $q \geqslant 2$.

D'autre part on démontre aisément les relations de différentiation suivantes :

$$|e\varkappa - \xi|^{-2q} = \frac{e^{2-q}}{(1 - e^2)(q-1)} \partial_e \left[ e^{q-1} |e\varkappa - \xi|^{-2(q-1)} \right] \qquad \text{(II-3.11)}$$

$$\xi\,|e\kappa-\xi|^{-2q} = e\kappa\,|e\kappa-\xi|^{-2q} + \frac{1}{2(q-1)}\,\partial_{e\kappa}\,|e\kappa-\xi|^{-2(q-1)} \qquad \text{(II-3.12)}$$

$$\text{où}\quad \partial_{e\kappa} = \left(\partial_{(e\kappa)_0},\ \nabla_{e\vec{\kappa}}\right)$$

En conséquence, par application répétée de ces relations on peut donc remplacer de proche en proche, chacun des termes en $|e_{n_i}\kappa_{n_i}-\xi_i|^{-2q}$ et $\xi_i\,|e_{n_i}\kappa_{n_i}-\xi_i|^{-2q}$ par une combinaison d'opérateurs différentiels agissant sur $|e_{n_i}\kappa_{n_i}-\xi_i|^{-4}$.

On peut donc considérer les expressions $Y_{n_i l_i m_i}(\xi_{n_i}\vec{k}_i)\,|e_{n_i}\kappa_{n_i}-\xi_i|^{-4}$, entrant dans l'intégrale (II-3.8), comme le résultat de l'action d'un opérateur différentiel que l'on peut sortir de l'intégrale $\mathcal{Y}_{n_i l_i m_i}(\partial_{e_{n_i}}, \partial_{e_{n_i}\kappa_{n_i}})$ à cinq variables sur $|e_{n_i}\kappa_{n_i}-\xi_i|^{-4}$. Par cette procédure on se ramène alors à la forme suivante :

$$T^{(2)}_{n_2/n_1}(\omega_1,\omega_2) = C_{n_1 n_2}\,\mathcal{Y}_{n_1 l_1 m_1}\left(\partial_{e_{n_1}}, \partial_{e_{n_1}\kappa_{n_1}}\right)\mathcal{Y}^{*}_{n_2 l_2 m_2}\left(\partial_{e_{n_2}}, \partial_{e_{n_2}\kappa_{n_2}}\right)$$
$$\iint_{S^3\times S^3} d\xi_1 d\xi_2\ \vec{\xi}_2\cdot\vec{\varepsilon}_2\,|e_{n_2}\kappa_{n_2}-\xi_2|^{-4}\,\Gamma(\xi_2,\xi_1)\,|e_{n_1}\kappa_{n_1}-\xi_1|^{-4}\,\vec{\xi}_1\cdot\vec{\varepsilon}_1 \qquad \text{(II-3.13)}$$

$$\text{où}\quad \partial_{e_{n_i}\kappa_{n_i}} = \left(\partial_{(e_{n_i}\kappa_{n_i})_0},\ \nabla_{e_{n_i}\vec{\kappa}_{n_i}}\right)$$

Le calcul de cette amplitude se ramène donc à l'évaluation d'une intégrale puis à la détermination de la forme des opérateurs $\mathcal{Y}_{n_i l_i m_i}(\partial_e, \partial_{e\kappa})$ et de leur action sur le résultat de l'intégration.

L'intégrale de l'expression ( II-3.13) a été introduite et calculée par J.P. GAZEAU (49).Lorsque la condition $\vec{\kappa}_{n_i}\cdot\vec{\varepsilon}_i = 0$ est vérifiée,comme dans notre cas, le résultat est le suivant :

$$\iint_{S^3\times S^3} d\xi_1 d\xi_2\ \vec{\xi}_2\cdot\vec{\varepsilon}_2\,|e_{n_2}\kappa_{n_2}-\xi_2|^{-4}\,\Gamma(\xi_2,\xi_1)\,|e_{n_1}\kappa_{n_1}-\xi_1|^{-4}\,\vec{\xi}_1\cdot\vec{\varepsilon}_1$$
$$= 4\pi^2\left[\frac{\vec{\varepsilon}_1\cdot\vec{\varepsilon}_2}{4}\,\mathcal{J}^{2-\nu}_{2}(e_{n_2}\kappa_{n_2}, e_{n_1}\kappa_{n_1}) + (e_{n_1}\vec{\kappa}_{n_1}\cdot\vec{\varepsilon}_2)(e_{n_2}\vec{\kappa}_{n_2}\cdot\vec{\varepsilon}_1)\,\mathcal{J}^{3-\nu}_{3}(e_{n_2}\kappa_{n_2}, e_{n_1}\kappa_{n_1})\right] \qquad \text{(II-3.14)}$$

Les fonctions $\mathcal{J}^{b}_{a}(e_{n_2}\kappa_{n_2}, e_{n_1}\kappa_{n_1})$ y ont pour définition générale (50) :

$$\mathcal{J}_a^b(e_{n_2}\kappa_{n_2}, e_{n_1}\kappa_{n_1}) = (e_{n_1>}\, e_{n_2>})^{-2a}\int_0^1 dz\, z^{b-1}\,|1 - R z \kappa_{n_1}\kappa_{n_2}|^{-2a}$$

$$= (e_{n_1>}\, e_{n_2>})^{-2a}\,\frac{1}{b}\,F_1\left(b, a, a, b+1; Re^{i\omega}, Re^{-i\omega}\right) \qquad \text{(II-3.15)}$$

où $R = \left(\frac{e_{n_1<}\, e_{n_2<}}{e_{n_1>}\, e_{n_2>}}\right)$ ; $e_{n_i\gtrless} = \underset{\text{inf.}}{\overset{\text{sup.}}{}}(e_{n_i}, 1)$ ; $b>1$ ; $\cos\omega = (\kappa_{n_1}\bar{\kappa}_{n_2})_0$

et $F_1(\alpha, \beta, \beta', \gamma; x, y)$ est une fonction hypergéométrique de Appell à deux variables ayant pour représentation intégrale (51):

$$F_1(\alpha,\beta,\beta',\gamma;x,y) = \frac{\Gamma(\gamma)}{\Gamma(\alpha)\,\Gamma(\gamma-\alpha)}\int_0^1 dz\, z^{\alpha-1}(1-z)^{\gamma-\alpha-1}(1-zx)^{-\beta}(1-zy)^{-\beta'} \qquad \text{(II-3.16)}$$

$$Re(\alpha)>0\ ;\ Re(\gamma-\alpha)>0$$

La structure des opérateurs $\mathcal{Y}_{nlm}$ dépend de la forme explicite des fonctions $Y_{nlm}(\xi)$ dont on connait l'expression en coordonnées polaires :

$$\xi \begin{cases} \xi_0 = \cos\alpha \\ \xi_1 = \sin\alpha\cos\theta \\ \xi_2 = \sin\alpha\sin\theta\cos\varphi \\ \xi_3 = \sin\alpha\sin\theta\sin\varphi \end{cases} \qquad \text{(II-3.17)}$$

on a : $Y_{nlm}(\xi) = Z_{n,l}(\alpha)\, Y_{lm}(\theta,\varphi)$

avec $Z_{n,l}(\alpha) = \left[\frac{n(n-l-1)!}{(n+l)!}\,\frac{2^{2l+1}(l!)^2}{\pi}\right]^{1/2}\sin^l\alpha\, C_{n-l-1}^{l+1}(\cos\alpha)$

où $C_\nu^\lambda(\cos\alpha)$ est un polynôme de Gegenbauer (26).

Plus particulièrement on obtient

$$Y_{100}(\xi) = (2\pi^2)^{-1/2}\ ;\ Y_{200}(\xi) = (2\pi^2)^{-1/2}\,2\xi_0 \qquad \text{(II-3.18)}$$

L'opérateur $\mathcal{Y}_{100}$ se réduit alors à une constante. Par contre l'expression de $\mathcal{Y}_{200}$ obtenue en comparant les relations (II-3.10), (II-3.11) et (II-3.12) est :

$$\mathcal{Y}_{200}(\partial_{e_{n_2}}, \partial_{e_{n_2}\kappa_{n_2}}) = (2\pi^2)^{-1/2}\,2\left\{\frac{p_2^2}{|K_2|^2}\left[\partial_{e\kappa_0} + \frac{(2+\nu)}{e^\nu}\partial_e e^2\right] - 1\right\} \qquad \text{(II-3.19)}$$

Par application des opérateurs $\mathcal{Y}_{nlm}$ sur les intégrales $\mathcal{J}_a^b$ on peut obtenir en principe les amplitudes cherchées. Nous explicitons ci-après le calcul dans les cas particuliers des transitions 1S $\longrightarrow$ 1S et 1S $\longrightarrow$ 2S.

## II-4. DIFFUSION ELASTIQUE SUR UN ATOME HYDROGENOIDE DANS L'ETAT FONDAMENTAL

Dans ce cas particulier on a respectivement :

$$\begin{cases} n_1 = n_2 = 1 \;\; ; \;\; \omega_1 = \omega_2 \; ; \; p_1 = p_2 = \lambda = Z \; ; \; x = \sqrt{-2(\omega_1 - \frac{1}{2})} \\ C_{1,1} = 2^8 x^3 \lambda^5 [(x+\lambda)^2 + k^2]^{-4} \;\; ; \;\; \mathcal{Y}_{100} = (2\pi^2)^{-1/2} \;\; ; \; |k_1| = |k_2| = k \end{cases} \quad \text{(II-4.1)}$$

D'où en remplaçant dans (II-3.13) :

$$T^{(2)}_{1/1}(\omega_1, \omega_1) = 2^9 x^3 \lambda^5 [(x+\lambda)^2 + k^2]^{-4} \left\{ \frac{\vec{\varepsilon}_1 \cdot \vec{\varepsilon}_2}{4} \frac{1}{2-\nu} F_1(2-\nu, 2, 2, 3-\nu; z, \bar{z}) \right.$$
$$\left. + \frac{4x^2}{[(x+\lambda)^2 + k^2]^2} (\vec{k}_1 \cdot \vec{\varepsilon}_2)(\vec{k}_2 \cdot \vec{\varepsilon}_1) \frac{1}{3-\nu} F_1(3-\nu, 3, 3, 4-\nu; z, \bar{z}) \right\} \quad \text{(II-4.2)}$$

où $z = \dfrac{[(x-\lambda)^2 + k^2]}{[(x+\lambda)^2 + k^2]} e^{i \operatorname{Arccos}[(n_1 \bar{n}_2)_0]}$ ; $\nu = \dfrac{\lambda}{x}$

Cette expression coïncide formellement avec celle obtenue par M. GAVRILA (45). Notons toutefois que la variable $z$ revêt ici une forme plus compacte, dans laquelle apparait notamment l'angle entre les deux vecteurs quadridimensionnels $n_1$ et $n_2$.

## II-5. TRANSITION RADIATIVE A DEUX PHOTONS ENTRE LES NIVEAUX $1S^{1/2}$ ET $2S^{1/2}$ D'UN ATOME HYDROGENOIDE (50) :

Dans ce cas particulier on a respectivement :

$$\begin{cases} n_1 = 1 \; ; \; n_2 = 2 \; ; \;\; p_1 = \lambda \; ; \; p_2 = \dfrac{\lambda}{2} \;\; ; \; x = \sqrt{-2(\omega_1 - \frac{1}{2})} \; ; \\ \omega_1 - \omega_2 = \dfrac{3}{8} \;\; ; \;\; C_{1,2} = 2^{11/2} x^3 \lambda^5 [(x + \frac{\lambda}{2})^2 + k_2^2]^{-2} [(x+\lambda)^2 + k_1^2]^{-2} \; ; \\ \mathcal{Y}_{200} = 2 (2\pi^2)^{-1/2} \left\{ \dfrac{p_2^2}{|k_2|^2} \left[ \partial_{(e_2 n_2)_0} + \dfrac{(2+\nu)}{e_2 \nu} \partial_{e_2} e_2^2 \right] - 1 \right\} \end{cases} \quad \text{(II-5.1)}$$

d'où en remplaçant dans (II-3.13) on obtient :

$$T^{(2)}_{2/1}(\omega_1,\omega_2) = C_{1,2}\, p_2^2 |K_2|^{-2} \left\{ (\vec{\varepsilon}_1.\vec{\varepsilon}_2)\alpha_2 + 4(\varrho_1\vec{\varkappa}_1.\vec{\varepsilon}_2)(\varrho_2\vec{\varkappa}_2.\vec{\varepsilon}_1)\alpha_3 \right\} \qquad \text{(II-5.2)}$$

où :

$$\alpha_m = -\frac{|K_2|^2}{p_2^2} \mathcal{J}^{m-\nu}_m + m\frac{(2+\nu)}{\nu} \mathcal{J}^{m-\nu}_{m+1} + 2m(\varrho_1\varkappa_1)_0 \mathcal{J}^{m+1-\nu}_{m+1} - m\varrho_1^2\left[\frac{(2+\nu)}{\nu}\varrho_2^2 + 2(\varrho_2\varkappa_2)_0\right]\mathcal{J}^{m+2-\nu}_{m+1} \qquad \text{(II-5.3)}$$

Nous avons cherché à rendre plus compacte encore l'expression de $\alpha_m$ (et donc de $T^2_{2/1}$ ) en réduisant à deux le nombre de fonctions $\mathcal{J}^b_a$ indépendantes. Dans ce but nous avons établi pour ces fonctions les relations de contiguïté suivantes :

$$2R^2 \mathcal{J}^{b+2}_{a+1} = \frac{b}{a}\mathcal{J}^b_a + 2R\cos\omega\, \mathcal{J}^{b+1}_{a+1} - \frac{1}{a}|1-R\varkappa_1\varkappa_2|^{-2a} \qquad \text{(II-5.4)}$$

$$R^2 \mathcal{J}^{b+2}_{a+1} = \frac{b-a}{a}\mathcal{J}^b_a + \mathcal{J}^b_{a+1} - \frac{1}{a}|1-R\varkappa_1\varkappa_2|^{-2a} \qquad \text{(II-5.5)}$$

Nous avons obtenu ces relations en introduisant dans l'intégrant de

$$\mathcal{J}^b_a = \int_0^1 dz\, z^{b-1}|1-zR\varkappa_1\varkappa_2|^{-2a}$$

l'opérateur

$$\frac{1}{a z^{a-1}}\partial_z z^a |1-zR\varkappa_1\varkappa_2|^{-2a} = |1-zR\varkappa_1\varkappa_2|^{-2a} - (2R^2z^2 - 2Rz\cos\omega)|1-zR\varkappa_1\varkappa_2|^{-2(a-1)} \qquad \text{(II-5.6)}$$

$$= (1-R^2z^2)|1-zR\varkappa_1\varkappa_2|^{-2(a-1)} \qquad \text{(II-5.7)}$$

avec :

$$\cos\omega = (\varkappa_1\bar{\varkappa}_2)_0$$

puis en effectuant des intégrations successives par parties.

Notons au passage que l'on peut obtenir d'autres relations de ce type par comparaison des équations ci-dessus et l'application répétée des formules (II-5.6) ou (II-5.7).

En utilisant (II-5-4) et (II-5.5) on obtient ainsi :

$$\alpha_m = 2m\varrho_1(\varkappa_{10} - \varkappa_{20}\cos\omega)\mathcal{J}^{m+1-\nu}_{m+1} + \left[2+\nu - \frac{|K_2|^2}{p_2^2} - \frac{(\varrho_2\varkappa_2)_0}{m-\nu}\right]\mathcal{J}^{m-\nu}_m + \left(\frac{2+\nu}{\nu} + \varrho_2^{-1}\varkappa_{20}\right)|1-R\varkappa_1\varkappa_2|^{-2m} \qquad \text{(II-5.8)}$$

où : $(\varrho_{ni}\varkappa_{ni})_0 = \dfrac{x^2 - p_{ni}^2 - k_i^2}{(x+p_{ni})^2 + k_i^2}$ ; $\varrho_{ni}^2 = \dfrac{(x-p_{ni})^2 + k_i^2}{(x+p_{ni})^2 + k_i^2} < 1$ ; $R = \varrho_1\varrho_2$

En guise de test de la validité du résultat (II-5.2) donnant $T^{(2)}_{2/1}$ nous avons étudié le comportement de cette amplitude au cours du passage à la limite $k_i \to o$ correspondant à l'approximation dipolaire :

$$\left[T^{(2)}_{2/1}(\omega_1,\omega_2)\right]_{dip.} = 2^{19/2}\,\nu^7(2+\nu)^{-6}(1+\nu)^{-4}(\vec{\varepsilon}_1\cdot\vec{\varepsilon}_2)\left[\alpha_2\right]_{dip.} \qquad \text{(II-5.9)}$$

où $\alpha_2$ se réduit à :

$$\left[\alpha_2\right]_{dip.} = \left\{-\left(\frac{2+\nu}{\nu}\right)^2\left[\mathcal{J}_2^{2-\nu}\right]_{dip.} + \frac{2(2+\nu)}{\nu(2-\nu)}\left(1-R_{dip.}\right)^{-4}\right. \qquad \text{(II-5.10)}$$

où :

$$R_{dip.} = \frac{(1-\nu)(2-\nu)}{(1+\nu)(2+\nu)}$$

et

$$\left[\mathcal{J}_2^{2-\nu}\right]_{dip.} = \frac{1}{2-\nu}\,F_1\left(2-\nu,2,2,3-\nu;R_{dip.},R_{dip.}\right) \qquad \text{(II-5.11)}$$

Cette expression se réduit, dans ce cas particulier, à (51)

$$\left[\mathcal{J}_2^{2-\nu}\right]_{dip.} = \frac{1}{2-\nu}\,{}_2F_1\left(2-\nu,4;3-\nu;R_{dip.}\right) \qquad \text{(II-5.12)}$$

la fonction hypergéométrique de Gauss ${}_2F_1$ se transforme à son tour (26) et on obtient finalement :

$$\left[T^{(2)}_{2/1}(\omega_1,\omega_2)\right]_{dip.} = \sqrt{2}\,\frac{64}{27}\,\nu^2(1+\nu)^{-1}(4-\nu^2)^{-1}\left[\frac{1+\nu}{3} - {}_2F_1\left(1,-1-\nu;3-\nu;R_{dip.}\right)\right] \qquad \text{(II-5.13)}$$

résultat obtenu par L.P. RAPOPORT et B.A. ZON (43) et par S. KLARSFELD (36), (52).

## II-6. AVANTAGES ET LIMITATIONS DE LA METHODE

Le formalisme présenté dans ce chapitre nous a permis d'obtenir, dans deux cas précis, des résultats tenant compte exactement de l'effet de retard. On peut se rendre compte aisément qu'au prix d'un léger effort d'assimilation du formalisme quadridimensionnel, ces résultats ont été obtenus de manière simple et relativement rapide en comparaison des démarches mentionnées ci-dessus § (II-1.).

D'autre part il apparait que la méthode est absolument générale et peut être étendue à l'étude de toutes les transitions radiatives du second ordre entre deux états liés. L'extension de la méthode au traitement des transitions vers les états du continuum nécessiterait l'introduction de nouveaux opérateurs intégro-différentiels correspondant aux opérateurs $\mathcal{Y}_{n\ell m}$ définis ci-dessus. La structure de ces nouveaux opé-

rateurs correspond aux fonctions harmoniques associées aux états du continuum (53). Bien entendu la nature des intégrations $S^3$ resterait formellement identique.

Pourtant malgré sa généralité, cette technique devient d'une application difficile si l'on étudie des transitions intéressant les états excités. En effet la complexité des opérateurs $\mathcal{Y}_{nlm}$ augmente rapidement avec n. Enfin il faut noter que le formalisme ne se simplifie pas notablement si l'on se restreint à l'approximation dipolaire, suffisante dans la plupart des applications.

L'ensemble de ces raisons nous a incité à explorer les possibilités offertes par les autres représentations et c'est ce que nous présenterons dans la suite de notre exposé.

# CHAPITRE III

# CONTRIBUTION NON RELATIVISTE AU DEPLACEMENT DE LAMB. LOGARITHME DE BETHE (54)

## III-I. POSITION DU PROBLEME

La mesure précise du déplacement de Lamb reste un des tests fondamentaux de l'électrodynamique quantique et la comparaison entre les résultats expérimentaux et les résultats théoriques, continue de susciter un grand intérêt (55),(84). Afin de situer la place de notre travail dans ce courant de recherches nous donnons ci-après un bref aperçu de la situation actuelle dans ce domaine.

### a) - Travaux expérimentaux.

Depuis l'expérience historique de W.E. LAMB et C.E. RETHERFORD en 1947 (56), les techniques expérimentales se sont constamment diversifiées et améliorées (57), (59). Pourtant, ce n'est qu'en 1971 qu'un important progrès qualitatif a été réalisé par C.W. FABJAN et F.M. PIPKIN (58) qui ont mis au point une méthode permettant de gagner un ordre de grandeur supplémentaire sur la précision de la détermination du déplacement de Lamb dans les états excités de l'hydrogène. Plus récemment, plusieurs équipes ont effectué des mesures avec une précision croissante dans les états excités $n \geqslant 3$ de H et $He^+$ (réf. 58, 60 - 64). Dans le tableau suivant, nous indiquons les références des derniers travaux expérimentaux. Pour être complet, nous y avons adjoint les références concernant les

TABLEAU 3.1

Références des travaux expérimentaux récents sur le déplacement de Lamb dans les systèmes hydrogénoïdes.

| Système hydrogénoïde | H | $He^+$ | $Li^{2+}$ | $C^{5+}$ | $O^{7+}$ |
|---|---|---|---|---|---|
| couche : n | | | | | |
| 2 | (59) | (59) (69) | (68) (174) | (67) | (65) (66) |
| 3 | (58) (60) | (72) | | | |
| 4 | (58) | (61) (64) | | | |
| 5 | (58) | (62) (63) (64) | | | |
| 6 | | (63) (64) | | | |
| 7 | | (64) | | | |

ions hydrogénoïdes lourds : ce nouveau thème de recherche a pour finalité de vérifier la validité du développement en puissance de ($\alpha$ Z) entrant dans l'expression théorique du déplacement de Lamb. Nous ne reviendrons pas sur ce dernier sujet et renvoyons le lecteur à l'article de synthèse de M. LEVENTHAL (70).

Signalons enfin que les progrès spectaculaires enregistrés ces dernières années en spectroscopie atomique ("Laser saturation spectroscopy", battements quantiques, spectroscopie à deux photons sans effet Döppler, etc...) permettent d'envisager un nouveau développement de ces mesures : la structure $2\,S_{1/2} - 2\,P_{1/2}$ a même pu être résolue optiquement (71),(175).

b) - Travaux théoriques

Rappelons que, pour un atome hydrogénoïde, l'expression du déplacement de Lamb d'un niveau donné (n, $\ell$, j) peut s'exprimer sous la forme d'un développement en série double de puissances de $\alpha$ (correspondant au nombre de photons mis en jeu) et de $Z\alpha$ (correspondant à l'interaction coulombienne) (73). Au premier ordre en $\alpha$, on obtient :

$$\Delta E_{n,\ell,j} = \frac{4\alpha\, mc^2}{3\pi\, n^3} \sum_{i\geq 4} \sum_{k\geq 0} A_{i,k}\, (Z\alpha)^i \, \mathrm{Log}^k (Z\alpha)^{-2} \qquad \text{(III-1.1)}$$

Si le noyau est supposé ponctuel et de masse infinie, les premiers coefficients du développement sont respectivement (73) :

$$A_{41} = \delta_{\ell,0}$$
$$A_{40} = \left(\frac{11}{24} - \frac{1}{5}\right)\delta_{\ell,0} + \frac{3}{8}\frac{C_{\ell j}}{(2\ell+1)} - \mathrm{Log}\, k_0(n,\ell) \qquad \text{(III-1.2)}$$

où : $$C_{\ell j} = (\ell+1)^{-1}\,\delta_{j,\ell+\frac{1}{2}} - \ell^{-1}\,\delta_{j,\ell-\frac{1}{2}}$$

correspond à la contribution du moment magnétique anomal de l'électron ; le terme $-\frac{1}{5}$ provient de la contribution du

graphe de polarisation du vide (fig.3.I-a) et log $k_o$ (n,ℓ) correspondant à la contribution non relativiste du graphe de self-énergie (fig.3.I-b) est communément appelé "logarithme de Bethe" ou plus exactement logarithme de l'énergie d'excitation moyenne du niveau (n,l) (54). Nous reviendrons plus loin sur la définition précise de ce dernier terme, objet de notre calcul.

3.1.a

3.1.b

A l'heure actuelle, le calcul des termes d'ordres supérieurs du développement $A_{50}$, $A_{62}$, $A_{61}$, $A_{60}$ et $A_{70}$ a été mené partiellement à bien en 1971 par G.W.ERICKSON (74). Quant aux termes d'ordres plus élevés en $\alpha^2$ représentant la contribution de graphes à deux photons leur évaluation a fait l'objet de nombreuses publications (55) (176) (75), (76). Notons que pour la comparaison avec l'expérience, il est nécessaire d'ajouter les contributions des effets liés à la taille et au recul du noyau et de tenir compte de sa structure pour Z 1 (59), (73), (76).

Il semblerait donc que la théorie fournisse maintenant une évaluation satisfaisante des corrections d'ordre élevé en ( $\alpha$ Z) . Or ces dernières corrections contribuent pour une faible part au déplacement observé dans l'hydrogène.
Ainsi les termes autres que $A_{41}$ et $A_{40}$, apportent une contribution de 7,3 MHz à la structure fine ($E_{2S_{1/2}} - E_{2P_{1/2}}$), soit 0,7°/₀ du déplacement total positif, qui est de 1057,9 MHz. Il se trouve de plus que, parmi les termes entrant dans la définition de $A_{40}$ et $A_{41}$, log $k_o$ (n,ℓ) qui apporte une contribution négative de 369,7 MHz, est la seule quantité qui ne soit pas calculable exactement. D'ailleurs l'examen de la bibliographie montre qu'il n'a été calculé analytiquement

avec une grande précision que pour les états n = 1 et n=2 (17) (77), (78).

Lorsque nous avons entrepris ce travail, l'étude la plus complète concernant tous les états de 1S à 4P était le calcul entièrement numérique de J.M. HARRIMAN (79) (nous reviendrons sur ces travaux dans la suite du chapitre). Pour les états encore plus excités, les seules données disponibles, en l'occurence les tables de J.D. GARCIA et J.E. MACK (80), reposaient sur une extrapolation des résultats de HARRIMAN (79). Pour ces derniers états, on se trouvait donc dans la situation paradoxale où l'on possédait de bonnes données théoriques sur les corrections d'ordres élevés du développement (III-1.1), alors qu'une incertitude non négligeable subsistait sur le terme d'ordre le plus bas.

Ces constatations nous ont donc incité d'une part à éventuellement améliorer les résultats de HARRIMAN pour $1 \leqslant n \leqslant 4$ et d'autre part à les étendre aux états $5 \leqslant n \leqslant 8$. Dans les paragraphes suivants nous exposons les méthodes analytiques et numériques que nous avons utilisées.

## III - 2. LE LOGARITHME DE BETHE

Comme nous l'avons signalé ci-dessus, le graphe de self-énergie apporte une contribution importante au déplacement de Lamb. Une application simple de la théorie des perturbations montre que le déplacement d'un niveau atomique $(n, \ell, j)$ est proportionnel à l'intégrale suivante :

$$\Delta E^{(S.E.)}_{n,\ell,j} \propto \int_0^\infty d\omega\, \omega \sum_{n'} \frac{\langle n\ell j | \vec{\alpha}.\vec{A} | n' \rangle \langle n' | \vec{\alpha}.\vec{A} | n\ell j \rangle}{E_{n\ell j} + \omega - E_{n'}} \qquad \text{(III-2.1)}$$

où l'indice n' symbolise la triade $(n', \ell', j')$ caractérisant les états atomiques intermédiaires appartenant soit au spectre discret soit au continuum ; $\vec{\alpha}$ représente la matrice de Dirac ; $\vec{A}$ le potentiel vecteur du champ électromagnétique et $\omega$ l'énergie

du photon émis puis absorbé par l'atome.

En 1947 H.A. BETHE (54) a proposé de séparer l'intervalle d'intégration en deux parties en introduisant une énergie K de coupure. $\Delta E^{(S.E.)}_{n,l,j}$ se décompose alors en deux parties :

$$\Delta E^{(S.E.)}_{n,\ell,j} = \Delta E^{S.E.}_{<}(K) + \Delta E^{S.E.}_{>}(K) \qquad \text{(III-2.2)}$$

et on choisit la coupure K de telle sorte qu'elle vérifie les inégalités $(Z\alpha)^2 mc^2 \ll K \ll mc^2$. Ceci permet d'utiliser une description non relativiste du système atomique dans le calcul de $\Delta E^{S.E.}_{<}(K)$. On constate d'autre part que $\Delta E^{S.E.}_{<}$ et $\Delta E^{S.E.}_{>}$ dépendent chacun de l'énergie de coupure K mais que celle ci doit disparaître du résultat final.

Dans son article fondamental (54), H.A. BETHE a montré qu'une contribution importante de ce graphe de self-énergie était donnée par le terme non relativiste $\Delta E^{S.E.}_{<}(K)$. La partie finie de ce terme, indépendante de K, est donnée par le Logarithme de Bethe dont nous donnons le calcul ci-après.

En explicitant le coefficient de proportionalité, l'expression de $\Delta E^{(S.E.)}_{<}(K)$ s'écrit,tous calculs faits

$$\Delta E^{(S.E)}_{<}(K)_{n,\ell} = -\alpha \frac{(Z\alpha)^4}{6\pi} mc^2 \Lambda_{n,\ell}(K) \qquad \text{(III-2.3)}$$

où l'on a fait apparaître que dans le cas non-relativiste le déplacement ne dépend que de n et $\ell$ et où $\Lambda_{n,\ell}(K)$ est l'élément de matrice du second ordre sans dimension :

$$\Lambda_{n,\ell}(K) = \mathcal{P}\int_0^K \omega\, d\omega \sum_{n'} \frac{\langle n\ell|\vec{p}.|n'\rangle\langle n'|\vec{p}|n\ell\rangle}{E_{n'} - E_n + \omega} \qquad \text{(III-2.4)}$$

où le symbole P signifie que l'on ne considère que la valeur principale de l'intégrale ($\Delta E_{<}$ correspondant à la partie réelle du déplacement).

Dans la suite de ce chapitre et pour nous conformer à

l'usage établi depuis les premiers travaux sur ce sujet, nous utiliserons le Rydberg (noté Ry.) comme unité d'énergie. Rappelons que :

1 Ry. = énergie d'ionisation de l'atome d'hydrogène ;
= 1/2 unité atomique d'énergie = $\frac{\alpha^2}{2} mc^2 \simeq 13{,}6$ eV

Le déplacement $\Delta E^{S.E.}_{<}(K)_{n,\ell}$ s'écrit alors :

$$\Delta E^{S.E.}_{<}(K)_{n,\ell} = - \frac{\alpha^3 Z^4}{3\pi} Ry. \Lambda_{n,\ell}(K) \qquad \text{(III-2.5)}$$

Les expressions précédentes appellent encore les remarques suivantes : tout d'abord l'expression (III-2.4) est obtenue après avoir sommé sur les directions de polarisation et intégré sur les directions de propagation du photon virtuel. D'autre part le produit scalaire $\vec{p}.\vec{p}$, entrant dans la définition de $\Lambda_{n,\ell}(K)$, étant rotationnellement invariant, l'élément de matrice est indépendant de l'orientation du moment angulaire du système, c'est-à-dire du nombre quantique magnétique m de l'état considéré : pour simplifier on posera donc dans la suite du calcul m = o. Enfin le calcul est effectué dans l'approximation dipolaire : H.A. BETHE a pu montrer que l'introduction de l'effet de retard n'apporte que des corrections négligeables (cf. référence 20 , § 19-$\gamma$ et pour une discussion plus récente voir (99) ).

Revenons au problème physique proprement dit : il apparaît clairement que l'expression de $\Delta E^{S.E.}_{<}(K)_{n,\ell}$ diverge linéairement en K. Suivant la suggestion de H.A. KRAMERS, (voir notamment l'introduction de la référence (1) ), H.A. BETHE (54) a montré que cette divergence peut être réduite en retranchant le terme de renormalisation de la masse. La contribution du diagramme de self-énergie au déplacement observable expérimentalement s'écrit alors :

$$\Delta E^{obs.}_{<}(K)_{n,\ell} = \Delta E^{S.E}_{<}(K)_{n,\ell} - \Delta E^{Ren.}_{<}(K) \qquad \text{(III-2.6)}$$

où : $$\Delta E_{<}^{\text{Ren.}}(K) = -\frac{\alpha^3 Z^4}{3\pi} Ry. \int_0^K d\omega \langle n,\ell | p^2 | n,\ell \rangle \qquad \text{(III-2.7)}$$

Or : $$\langle n,\ell | p^2 | n,\ell \rangle = \sum_{n',\ell'} |\langle n,\ell | \vec{p} | n',\ell' \rangle|^2 \qquad \text{(III-2.8)}$$

et en remplaçant dans (III-2.6) on obtient :

$$\Delta E_{<}^{\text{obs}}(K)_{n,\ell} = \frac{\alpha^3 Z^4}{3\pi} Ry. \int_0^K d\omega \sum_{n',\ell'} \frac{|\langle n,\ell | p | n',\ell' \rangle|^2 (E_{n'} - E_n)}{E_{n'} - E_n + \omega} \qquad \text{(III-2.9)}$$

puis, intégrant sur $\omega$, il vient, en supposant $K \gg |E_{n'} - E_n|$ :

$$\Delta E_{<}^{\text{obs}}(K)_{n,\ell} = \frac{\alpha^3 Z^4}{3\pi} Ry. \sum_{n',\ell'} |\langle n,\ell | p | n',\ell' \rangle|^2 (E_{n'} - E_n) \operatorname{Log} \frac{K}{|E_{n'} - E_n|} \qquad \text{(III-2.10)}$$

C'est à ce stade du calcul que H.A. BETHE a introduit $k_o(n,\ell)$ en posant :

$$\sum_{n'\ell'} |\langle n,\ell | p | n',\ell' \rangle|^2 (E_{n'} - E_n) \operatorname{Log} |E_{n'} - E_n| = \operatorname{Log} k_o(n,\ell) \sum_{n',\ell'} |\langle n,\ell | p | n',\ell' \rangle|^2 (E_{n'} - E_n) \qquad \text{(III-2.11)}$$

où $k_o(n,\ell)$ est appelée "énergie d'excitation moyenne". La somme du second membre est connue (20) et se réduit à :

$$\sum_{n',\ell'} |\langle n,\ell | p | n',\ell' \rangle|^2 (E_{n'} - E_n) = \frac{1}{2} \langle n,\ell | \left[ [H,\vec{p}]\cdot, \vec{p} \right] | n,\ell \rangle = \frac{8}{n^3} \delta_{\ell,0} \qquad \text{(III-2.12)}$$

Remarquons que la relation de définition (III-2.11) de $\operatorname{Log} k_o(n,\ell)$ n'a pas de sens pour $\ell \neq o$ puisqu'alors le second membre s'annulerait identiquement. Pour étendre la validité de la définition au cas $\ell \neq o$ on modifie légèrement cette relation en posant :

$$\text{Log } k_o(n,\ell) \sum_{n'\ell'} |\langle n,\ell|p|n',\ell'\rangle|^2 (E_{n'}-E_n) = \sum_{n',\ell'} |\langle n,\ell|p|n',\ell'\rangle|^2 (E_{n'}-E_n) \text{Log} |E_{n'}-E_n| \quad \text{(III-2.13)}$$

où la somme infinie du membre de gauche doit être calculée pour l'état $\ell = o$ ayant le même nombre quantique principal n que l'état considéré.

On en déduit :

$$\Delta E^{obs}_{<}(K)_{n,\ell} = \frac{8\alpha^3 Z^4}{3\pi n^3} Ry. \left[ \text{Log } K \, \delta_{\ell,o} - \text{Log } k_o(n,\ell) \right] \quad \text{(III-2.14)}$$

Quant à la divergence logarithmique en Log K, celle-ci disparaitra de l'expression finale du déplacement observé lorsqu'on ajoutera à $\Delta E^{obs}_{<}(K)_{n,\ell}$ la contribution relativiste $\Delta E^{S.E.}_{>}(K)_{n,\ell,j}$ (1), (20).

Les premières évaluations du logarithme de l'énergie d'excitation moyenne ou logarithme de Bethe Log $k_o(n,\ell)$, étaient basées sur l'évaluation numérique directe de la formule de définition (III-2. 13). Cette technique, basée sur le calcul de forces d'oscillateurs et utilisant la vérification de règles de somme comme critère numérique à été mise au point par H.A. BETHE, L.M. BROWN et J.R. STEHN en 1950 (81) pour les états 2S et 2P. Elle a été ensuite reprise en 1956 par J.M. HARRIMAN (79) pour tous les états 1S à 4P. Nous même l'avons utilisée et améliorée quelque peu pour les états encore plus excités jusqu'à n = 8 inclus (82), nous reviendrons donc sur cette méthode dans un paragraphe suivant.

Cependant, pour obtenir une meilleure précision il est possible de calculer Log $k_o(n,\ell)$ à partir d'expressions analytiques exactes de l'élément de matrice du second ordre entrant dans la définition de $\Lambda_{n,\ell}(K)$. En effet en comparant les

relations (III-2.5), (III-2.7) et (III-2.14) on vérifie que :

$$\text{Log } k_0(n,\ell) = \lim_{K\to\infty}\left[\frac{n^3}{8}\Lambda_{n,\ell}(K) - \frac{n^3}{8}\langle n,\ell|p^2|n,\ell\rangle + \text{Log } K\,\delta_{\ell,0}\right] \qquad \text{(III-2.15)}$$

Or, d'après le théorème du viriel

$$\langle n,\ell|p^2|n,\ell\rangle = \frac{2}{n^2}\,Ry.$$

et l'on obtient une relation de définition de Log $k_o$ $(n,\ell)$, équivalente, mais formellement différente de l'expression originale (III-2.13)

$$\text{Log } k_0(n,\ell) = \lim_{K\to\infty}\left[\frac{n^3}{8}\Lambda_{n,\ell}(K) - \frac{n}{4}K + \text{Log } K\,\delta_{\ell,0}\right] \qquad \text{(III-2.16)}$$

Bien entendu, il n'est intéressant de suivre cette voie que si l'on utilise une technique permettant le calcul implicite de la somme infinie entrant dans la définition de $\Lambda_{n,\ell}(K)$. C'est d'ailleurs en envisageant ce problème que C. SCHWARTZ et J.J. TIEMAN (17) ont mis au point leur méthode, décrite ci-dessus § I-2, gagnant en précision plusieurs ordres de grandeur pour les états 2S et 2P.

Plus récemment, M. LIEBER (77), utilisant la représentation de SCHWINGER de la fonction de Green coulombienne Eq.(II-3.11) a obtenu également des résultats plus précis pour les états 1S, 2S, 2P. Notons cependant que la généralisation de cette méthode aux états plus excités se heurte à des difficultés similaires à celles que nous avions notées, lors de l'utilisation du formalisme quadridimensionnel introduit par la projection de Fock : voir le § (II-6).

R.W. HUFF (78) a également publié des résultats pour les états 1S, 2S, 2P en utilisant une méthode algébrique inspirée des travaux de C. FRONSDAL (48) sur les propriétés du groupe dynamique SO (4,2) de l'atome d'hydrogène. Comme dans le cas précédent, la généralisation aux états plus excités présente de grandes difficultés et n'a pas été tentée.

Pour vérifier et éventuellement améliorer les résultats de HARRIMAN (1S à 4P), nous avons choisi d'utiliser la

représentation de la fonction de Green Eq. (I-4.6 ) donnée par L. HOSTLER, dont la forme (représentation intégrale) est bien adaptée à la recherche d'expressions analytiques ; voir ci-après le paragraphe (III-3). Cependant, la complication croissante des calculs pour les états très excités ne nous a pas permis d'étendre ces résultats aux cas $n > 4$, à l'aide de cette méthode. Nous sommes donc revenu à une technique entièrement numérique pour ces états ; voir ci-après le paragraphe(III-4).

## III-3. ETATS 1S à 4P : CALCUL DE $\Lambda_{n,\ell}(K)$

D'après la relation (III-2.17), le calcul de $\mathrm{Log}\, k_o(n,\ell)$ se ramène à celui de $\Lambda_{n,\ell}(K)$ que l'on peut écrire, d'après (III-2.4) :

$$\Lambda_{n,\ell}(K) = \mathcal{P} \int_0^K \omega\, d\omega \, \langle n\ell | \vec{p}.G(E_n-\omega)\vec{p} | n\ell \rangle \qquad \text{(III-3.1)}$$

où G (W) est la fonction de Green coulombienne.

L'évaluation de $\Lambda_{n,\ell}(K)$ s'effectue en deux étapes : la première correspondant au calcul analytique des éléments de matrice $\langle n\ell | \vec{p}.G\vec{p} | n\ell \rangle$ et la seconde à l'intégration sur $\omega$ . Notons que cette dernière peut toujours être effectuée numériquement par quadrature, mais qu'il est possible également de faire un calcul presque entièrement analytique, comme nous le montrerons ci-après. Nous avons donc systématiquement intégré par les deux méthodes afin d'être plus sûr de la validité de notre résultat.

### III-3. A EXPRESSION ANALYTIQUE DE $\langle n\ell | \vec{p}\, G.\vec{p} | n\ell \rangle$

Le calcul de la partie angulaire est effectué en utilisant le développement en ondes partielles de la fonction de Green :

$$G(\vec{r},\vec{r}';W) = \sum_{\lambda,\mu} G_\lambda(r,r';W)\, Y^*_{\lambda,\mu}(\hat{r})\, Y_{\lambda,\mu}(\hat{r}') \qquad \text{(III-3.2)}$$

où $G_\lambda$ (r, r' ; W) est la partie radiale de G pour le moment angulaire $\lambda$ . L'intégration angulaire s'effectue alors sans difficulté et l'on obtient :

$$\langle n\ell|\vec{p}_0\, G(E_n-\omega)\,\vec{p}|n\,\ell\rangle = \frac{\ell+1}{2\ell+1}\int_0^\infty r^2dr\int_0^\infty r'^2dr'\,(a(r)\,G_{\ell+1}(r,r';E_n-\omega)\,a(r') + \frac{\ell}{2\ell+1}\int_0^\infty r^2dr\int_0^\infty r'^2dr'\,b(r)\,G_{\ell-1}(r,r';E_n-\omega)\,b(r') \quad \text{(III-3.3)}$$

avec : $a(r) = \left[\frac{d}{dr} - \frac{\ell}{r}\right] R_{n,\ell}(r)$ ; $b(r) = \left[\frac{d}{dr} + \frac{\ell+1}{r}\right] R_{n,\ell}(r)$ (III-3.4)

$R_{n,\ell}(r)$ étant une fonction d'onde radiale hydrogénoïde :

$$R_{n,\ell}(r) = \frac{2^{\ell+1}}{(2\ell+1)!}\,\frac{1}{n^{\ell+2}}\left[\frac{(n+\ell)!}{(n-\ell-1)!}\right]^{1/2} e^{-r/n}\, r^{\ell}\, {}_1F_1\left(-n+\ell+1;\,2\ell+2;\,\frac{2r}{n}\right) \quad \text{(III-3.5)}$$

On constate aisément que les deux termes de la relation (III-3.3) correspondent respectivement aux voies $\ell \to \ell+1 \to \ell$ et $\ell \to \ell-1 \to \ell$ , seules permises par le couplage des moments angulaires.

Si l'on remplace $R_{n,\ell}(r)$ par son expression dans (III-3.3), il apparaît que cette équation se réduit à une combinaison linéaire d'intégrales de la forme générale :

$$J^{\nu,\nu'}_{\lambda,p}(W) = \int_0^\infty dr\, r^{\lambda+p}\int_0^\infty dr'\, r'^{\lambda+p}\, e^{-\nu r-\nu' r'}\, G_\lambda(r,r';W) \quad \text{(III-3.6)}$$

où le paramètre p est un entier $\geq 1$. Ces intégrales sont calculées en introduisant la représentation intégrale (I-4.6) de $G_\lambda(W)$:

$$G_\lambda(r,r';W) = -\frac{2^\lambda}{\sqrt{rr'}}\int_0^\infty dt\, \exp\left[-(r+r')\frac{\mathrm{ch}t}{\sigma}\right] \coth^{2\sigma}\frac{t}{2}\, I_{2\lambda+1}\left(\frac{2}{\sigma}\sqrt{rr'}\,\mathrm{sh}t\right) \quad \text{(III-3.7)}$$

où nous avons posé $\sigma = (-1/W)^{1/2}$ ; $\mathrm{Re}\,\sigma < 1$ (W étant exprimé ici en Ry., on peut vérifier que $\sigma = \frac{1}{x}$ , x étant le paramètre figurant dans l'expression (I-4.6)). En remplaçant (III-3.6) on a :

$$J^{\nu,\nu'}_{\lambda,p}(W) = -2\int_0^\infty dt\, \coth^{2\sigma}\frac{t}{2}\int_0^\infty dr\, r^{\lambda+p-\frac{1}{2}}\, e^{-\left(\frac{\mathrm{ch}t}{\sigma}+\nu\right)r} \times\int_0^\infty dr'\, r'^{\lambda+p-\frac{1}{2}}\, e^{-\left(\frac{\mathrm{ch}t}{\sigma}+\nu'\right)r'}\, I_{2\lambda+1}\left(\frac{2}{\sigma}\sqrt{rr'}\,\mathrm{sh}t\right) \quad \text{(III-3.8)}$$

Dans le cas particulier p = 1 (cf. Réf. 83, paragraphe 3.8.3) ; posant $r'^{1/2} = u$ on obtient :

$$\int_0^\infty du\, u^{2\lambda+2}\, e^{-\beta u^2}\, I_{2\lambda+1}(\alpha u) = \alpha^{2\lambda+1}\,(2\beta)^{-2\lambda-2}\, e^{-\frac{\alpha^2}{4\beta}} \qquad \text{(III-3.9)}$$

$$\mathrm{Re}\,(2\lambda+1) > -1 \;;\; \mathrm{Re}\,\beta > 0$$

L'intégrale sur r est élémentaire et l'on transforme finalement l'intégrale sur r en posant $q = \mathrm{th}^2 \frac{t}{2}$, obtenant :

$$J_{\lambda,1}^{\nu,\nu'}(W) = \frac{2^{\lambda+2}(2\lambda+1)!\,\sigma^{2\lambda+3}}{[(1+\nu\sigma)(1+\nu'\sigma)]^{2\lambda+2}} \int_0^1 dq\, q^{\lambda-\sigma}(1-\beta q)^{-2\lambda-2} \qquad \text{(III-3.10)}$$

où $\beta = \frac{(\nu\sigma-1)(\nu'\sigma-1)}{(\nu\sigma+1)(\nu'\sigma+1)}$

La dernière intégrale sur q est la représentation intégrale d'une fonction hypergéométrique de Gauss. En effet, on a plus généralement (26), (83) :

$$\int_0^1 dq\, q^{b-1}(1-q)^{c-b-1}(1-\beta q)^{-a} = \frac{\Gamma(b)\Gamma(c-b)}{\Gamma(c)}\, {}_2F_1(a,b;c;\beta) \qquad \text{(III-3.11)}$$

On obtient donc :

$$J_{\lambda,1}^{\nu,\nu'}(W) = \frac{2^{\lambda+2}(2\lambda+1)!\,\sigma^{2\lambda+3}}{[(1+\nu\sigma)(1+\nu'\sigma)]^{2\lambda+2}}\,(\lambda+1-\sigma)^{-1}\, {}_2F_1(2\lambda+2, \lambda+1-\sigma; \lambda+2-\sigma; \beta) \qquad \text{(III-3.12)}$$

résultat obtenu antérieurement, pour cette intégrale particulière, par L.P. RAPOPORT et B.A. ZON en 1968 (43) (*)

Dans le cas $p \neq 1$, on se ramène au cas précédent à l'aide de la relation :

$$J_{\lambda,p}^{\nu,\nu'}(W) = \left[\frac{\partial^{(p-1)}}{\partial\nu^{p-1}}\right]\left[\frac{\partial^{(p-1)}}{\partial\nu'^{p-1}}\right] J_{\lambda,1}^{\nu,\nu'}(W) \qquad \text{(III-3.13)}$$

Pour expliciter l'action de l'opérateur $\frac{\partial}{\partial\nu}$ sur $J_{\lambda,1}^{\nu,\nu'}(W)$ il est plus simple de le faire agir sur la forme intégrale (III-3.10). Puis à l'aide des relations de contiguïté entre fonctions hypergéométriques, il est possible de montrer que les dérivées par rapport à $\nu$ (ou $\nu'$) peuvent s'exprimer en fonction de $J_{\lambda,1}^{\nu,\nu'}(W)$ elle-même. On obtient ainsi la relation de différentiation suivante (symétrique en $\nu$ et $\nu'$) :

$$\frac{\partial}{\partial\nu} J_{\lambda,1}^{\nu,\nu'}(W) = 2\sigma^2(\nu^2\sigma^2-1)^{-1}\left\{\frac{(2\lambda+1)!}{(\nu+\nu')^{2\lambda+2}} - [\nu(\lambda+1)-\sigma]\, J_{\lambda,1}^{\nu,\nu'}(W)\right\} \qquad \text{(III-3.14)}$$

---

(*) Nous avons relevé une erreur typographique dans la formule donnée par ces auteurs il faut lire : $J_0(\beta,\beta') = 2^{2\lambda+2}(2\lambda+1)!\ldots$ et non $2^{\lambda+2}\ldots$ dans leur article ref. (43).

Dans notre cas particulier $\nu = \nu' = \frac{1}{n}$ et d'après (III-3.7) on a $\sigma = \left(\frac{1}{n^2} + \omega\right)^{-1/2}$ vérifiant $0 \leq \sigma \leq n$ lorsque $K \to \infty \geqslant \omega \geqslant 0$.

L'application répétée de la formule (III-3.14) permet d'expliciter l'élément de matrice (III-3.3) en opérant les substitutions nécessaires. Dans la table suivante nous donnons la liste des expressions analytiques obtenues pour les éléments de matrice $\langle n\ell | \vec{p} . G \vec{p} | n\ell \rangle$ pour tous les états 1S à 4P. Notons simplement que dans ce tableau nous avons introduit la variable $y = \frac{\sigma}{n}$ qui est définie dans l'intervalle $y = [0,1]$ ce qui simplifie l'évaluation des intégrales que nous étudierons dans le paragraphe suivant .

## III-3 B CALCUL DE L'INTEGRALE $\Lambda_{n,\ell}(K)$

Avant de décrire cette intégration, rappelons qu'il est nécessaire auparavant de séparer les parties de l'intégrant qui conduisent à des divergences afin d'évaluer $\mathrm{Log}\, k_o(n,\ell)$ à partir de la formule (III-2.16). En utilisant la nouvelle variable y, définie ci-dessus $\Lambda_{n,\ell}(K)$ s'écrit :

$$\Lambda_{n,\ell}(K) = \frac{2}{n^4} \mathcal{P} \int_{(1+n^2K)^{-1/2}}^{1} dy\, y^{-5}(1-y^2) \langle n\ell | \vec{p} . G \vec{p} | n\ell \rangle \qquad \text{(III-3.15)}$$

Après avoir remplacé $\langle n\ell | \vec{p} . G \vec{p} | n\ell \rangle$ par son expression donnée dans le Tableau I, il convient donc d'étudier le comportement de l'intégrant et plus particulièrement des fonctions hypergéométriques qu'il contient, à la limite inférieure d'intégration $y = (1+n^2 K)^{-1/2} \to 0$ (lorsque $K \to \infty$) . Or on constate que ces fonctions sont toutes de la forme particulière suivante (*) :

$$ {}_2F_1(m, b; b+1; z); \quad z = \left(\frac{1-y}{1+y}\right)^2; \quad m = 2\lambda+2 \geqslant 2 \qquad \text{(III-3.16)}$$

(*) reliée à la fonction Beta-incomplète (cf. Réf. 26, § 2.5.3)

# TABLEAU 3-2

| Etat | Expressions Analytiques de $\langle n\ell \vert \vec{p}\, G\cdot\vec{p} \vert n\ell\rangle$ |
|---|---|
| 1S | $2^7.3\, y^5 (2-y)^{-1}(1+y)^{-8}\, {}_2F_1(4, 2-y; 3-y; z)$ |
| 2S | $2^8.3\, y^5 (1-y)^{-1}(1+y)^{-8}\, {}_2F_1(4, 2-2y; 3-2y; z) + 6y^2(y^2-1)^{-1}$ |
| 2S | $2^7.3\, y^5 (2-3y)^{-1}(1+y)^{-8}(y^2-1)^{-1}(7y^2-3)^2\, {}_2F_1(4, 2-3y; 3-3y; z) + 2^3 y^2 (y^2-1)^{-2}(5y^2-1)$ |
| 4S | $2^{10}.3^{-1}\, y^5 (1-2y)^{-1}(1+y)^{-8}(y^2-1)^{-4}(23y^4+18y^2+3)^2\, {}_2F_1(4, 2-4y; 3-4y; z) + 2.3^{-1} y^2 (y^2-1)^{-4}(733y^6-935y^4+375y^2-45)$ |
| 2P | $2^{12}.3^{-1}.5\, y^7 (3-2y)^{-1}(1+y)^{-12}\, {}_2F_1(6, 3-2y; 4-2y; z) + 2.3^{-2} y^2 (y^2-1)^{-2}(5y^2+3) + 2^8.3^{-2} y^7 (1-2y)^{-1}(y^2-1)^{-2}(1+y)^{-4}\, {}_2F_1(2, 1+2y; 2-2y; z)$ |
| 3P | $2^9.3^{-1}\, y^7 (1-3y)^{-1}(y-1)^{-4}(y+1)^{-8}(3y^2-1)\, {}_2F_1(6, 3-2y; 4-2y; z) + 2.3^{-1} y^2 (y^2-1)^{-4}(59y^6-29y^4+y^2+1)$ $+ 2^{13}.3^{-1}.5\, y^7 (1-y)^{-1}(1+y)^{-12}\, {}_2F_1(6, 3-3y; 4-3y; z) + 2^2.3^{-1}.5\, y^2 (y^2-1)^{-1}$ |
| 4P | $2^2.3^{-1} y^2 (y^2-1)^{-2}(35y^2-19) + 2^{14}.3^{-1} y^7 (y^2-1)^{-2}(9y^2-5)^2 (3-4y)^{-1}(1+y)^{-12}\, {}_2F_1(6, 3-4y; 4-4y; z) - 2.3^{-1} y^2 (y^2-1)^{-1}$ $+ 2^{10}.3^{-2}.5^{-1} y^7 (y^2-1)^{-6}(57y^4-38y^2+5)(1-4y)^{-1}(1+y)^{-4}\, {}_2F_1(2, 1-4y; 2-4y; z) + 2^5.3^{-2}.5^{-1} y^4 (y^2-1)^{-6}(33y^4-18y^2+1)(57y^4-38y^2+5)$ |
| 3D | $2^{15}.3.5^{-1}.7\, y^9 (4-3y)^{-1}(1+y)^{-16}\, {}_2F_1(8, 4-3y; 5-3y; z) + 2^{11}.3.5^{-1} y^9 (2-3y)^{-1}(1+y)^{-10}(y-1)^{-2}\, {}_2F_1(4, 2-3y; 3-3y; z) + 2^2.5^{-1} y^2 (y^2-1)^{-2}(y^2+5)$ |

Notations : $y = \frac{\sigma}{n} = (1+n^2\omega)^{-1/2}$ ; intervalle de définition : $0 \leq \omega \leq \kappa \to \infty$, $1 \geqslant y \geqslant (1+n^2\kappa)^{-1/2} \to 0$

$z = \left(\frac{1-y}{1+y}\right)^2$

Fonction hypergéométrique de Gauss : ${}_2F_1(a, b; c; z) = 1 + \frac{ab}{c}\frac{z}{1!} + \frac{a(a+1)b(b+1)}{c(c+1)}\frac{z^2}{2!} + \ldots$

A la limite $y \to 0$ la variable $z \to 1$ et cette fonction diverge, comme on peut s'en assurer en vérifiant que le critère de convergence n'est pas rempli (Cf. Réf. 26 § 2.1.1). Pour mettre en évidence le mode de variation de ce type de fonction par rapport à la variable y, on peut noter que son développement en série :

$$b^{-1}\,{}_2F_1(m,b;b+1;z) = \frac{1}{(m-1)!}\sum_{q=0}^{\infty}\frac{(m-1+q)(m-2+q)\cdots(1+q)}{b+q}\,z^q \qquad \text{(III-3.17)}$$

peut s'écrire (85) :

$$b^{-1}\,{}_2F_1(m,b;b+1;z) = \frac{(m-1-b)!}{(m-1)!}\sum_{q=0}^{\infty}\frac{(m-2+q)\cdots(1+q)}{b+q}\,z^q + \frac{1}{(m-1)!}\sum_{q=0}^{\infty}(m-2+q)(m-3+q)\cdots(1+q)\,z^q \qquad \text{(III-3.18)}$$

où le deuxième terme est en fait égal à : $\frac{1}{m-1}(1-z)^{1-m}$

En répétant cette décomposition m-1 fois, on obtient le développement suivant :

$$b^{-1}\,{}_2F_1(m,b;b+1;z) = \frac{1}{m-1}(1-z)^{1-m} + \frac{(m-1-b)}{(m-1)(m-2)}(1-z)^{2-m} + \cdots + \frac{(m-1-b)\cdots(2-b)}{(m-1)!}(1-z)^{-1} + \frac{(m-1-b)\cdots(1-b)}{(m-1)!}\sum_{q=0}^{\infty}\frac{z^q}{q+b} \qquad \text{(III-3.19)}$$

Puisque $(1-z) = 4y\,(1+y)^{-2}$, il est facile de vérifier que nous avons séparé les termes en puissances négatives de y qui rendent divergente la fonction hypergéométrique à la limite $K \to \infty$ $(y \to 0)$. Notons au passage que la plupart des termes de l'intégrant qui divergent pour $K \to \infty$, sont compensés par des facteurs algébriques tendant vers zéro pour cette même limite. Les divergences "irréductibles" ne seront compensées qu'en dernier ressort, lors du calcul de $\mathrm{Log}\ k_o(n,\ell)$ proprement dit. En effet, en remplaçant y par sa valeur en fonction de K à la borne inférieure d'intégration, on doit constater que ces divergences compensent les termes $-\frac{n}{4}K$

et Log K $\delta_{\ell,0}$ figurant dans l'expression (III-2.16) de Log $k_o$ $(n,\ell)$ ; Remarquons d'ailleurs que cette compensation des termes divergents de (III.2.16) fournit un excellent critère de la validité des expressions de $\langle n\ell | \vec{p}\,\vec{G}.\vec{p} | n\ell \rangle$ figurant dans le tableau(3-2).

Ce processus d'extraction accompli, nous pouvons remplacer la limite inférieure d'intégration par y = o. Pourtant, avant de commencer l'intégration proprement dite, il convient d'examiner encorel'intégrant : comme on peut le constater dans le tableau (3-2), l'expression de $\langle n\ell | \vec{p}\,\vec{G}\,\vec{p} | n\ell \rangle$ présente parfois une singularité apparente en y = 1, borne supérieure d'intégration. L'indétermination qui en résulte est facilement levée par un simple quotient de polynômes.

Enfin pour les états autres que 1S et 2S, certains termes de l'intégrant présentent un pôle simple, correspondant physiquement à la désexcitation possible du niveau considéré par l'émission d'un photon réel. Le calcul ne présente alors pas de difficulté cependant, puisque nous nous intéressons à la valeur principale de Cauchy de l'intégrale(x).

A ce stade du calcul, après avoir extrait ou réduit les divergences de $\Lambda_{n,\ell'}$, l'intégrale initiale se présente sous la forme d'une combinaison linéaire d'intégrales élémentaires connues (cf. Réf. 89, § 2.111)

$$J(p,q) = \int_0^1 dy\, y^p (1+y)^{-q} = 2^{1-q}(p+1-q)^{-1} - p(p+1-q)^{-1} J(p-1,q) ;$$

Si $q = p+1$ : $J(p,p+1) = -2^{-p}p^{-1} + J(p-1,p)$; (III-3.20)

D'autre part : $J(0,q) = [1 - 2^{1-q}](q-1)^{-1}$;

$$J(0,1) = \log 2$$

---

(x) En effet on peut toujours se ramener par un changement de variable approprié à une intégrale non singulière de la forme suivante (88) :

$$\mathcal{P}\int_{-a}^{+a} du\, \frac{f(u)}{u} = \int_0^a du\, \frac{f(u) - f(-u)}{u}$$

compte tenu du fait que f (u) est continue et dérivable au voisinage de l'origine.

Il n'est cependant pas possible d'effectuer le calcul analytique de tous les termes, car l'intégrant comprend toujours au moins une somme infinie du type $\sum_{q=0}^{\infty} z^q (q+b)^{-1}$ provenant du développement (III-3.19) de la fonction hypergéométrique. Or, cette somme n'est pas calculable exactement et doit être évaluée numériquement ainsi que l'intégrale correspondante. En remplacant z et b par leurs valeurs respectives en fonction de y, on a

$$\sum_{q=0}^{\infty} \frac{z^q}{q+b} = \sum_{q=0}^{\infty} \left(\frac{1-y}{1+y}\right)^{2q} (q+\lambda+1-ny)^{-1} \; ; \qquad \text{(III-3.21)}$$

où $\lambda$ représente le moment angulaire = $\ell \pm 1$ du système atomique dans l'état intermédiaire et n est le nombre quantique principal du niveau étudié.

On constate tout d'abord qu'à la limite inférieure d'intégration (y = o) cette série, considérée isolément, diverge, mais on peut montrer alors que l'intégrale reste finie. Pour cela on effectue le changement de variable $X = \frac{1-y}{1+y}$ qui ne modifie pas les bornes d'intégration. La série s'écrit alors :

$$\sum_{q=0}^{\infty} \frac{X^{2q}}{q+\alpha} = \frac{1}{\alpha} + \sum_{q=1}^{\infty} \frac{X^{2q}}{q+\alpha} \qquad \text{(III-3.22)}$$

où $$\alpha = [\lambda+1-n + (\lambda+1+n)X](1+X)^{-1} \qquad \text{(III-3.23)}$$

La dernière somme peut être décomposée à son tour

$$\sum_{q=1}^{\infty} \frac{X^{2q}}{q+\alpha} = \sum_{q=1}^{\infty} \frac{X^{2q}}{q} - \alpha \sum_{q=1}^{\infty} \frac{X^{2q}}{q(q+1)} - \alpha(1-\alpha) \sum_{q=1}^{\infty} \frac{X^{2q}}{q(q+1)(q+\alpha)} \cdots \qquad \text{(III-3.24)}$$

$$= -\log(1-X^2) - \alpha\left[1 + \frac{1-X^2}{X^2}\log(1-X^2)\right] - \alpha(1-\alpha)\sum_{q=1}^{\infty} \frac{X^{2q}}{q(q+1)(q+\alpha)} \qquad \text{(III-3.25)}$$

Or dans l'intégrant cette somme est multipliée par un facteur algébrique polynomial en X. La contribution des deux premiers termes du développement ( III-3.25) se réduit donc à une combinaison linéaire d'intégrales du type particulier suivant (cf. Réf. 89, § 4-295), calculable exactement

$$\int_0^1 dX\, X^p \log(1-X^2) = \frac{1}{p+1}\left[\psi\left(\frac{p+3}{2}\right) - \psi(1)\right] \; ; \; p > -1 \; ; \qquad \text{(III-3.26)}$$

où $\Psi$ (z) est la fonction dérivée logarithmique de la fonction $\Gamma(z)$(88) ; c'est-à-dire :

$$\int_0^1 dX\, X^p \log(1-X^2) = \frac{2}{p+1}\left[\sum_{k=1}^{p+1} \frac{1}{2k-1} - \log 2\right] \qquad \text{(III-3.27)}$$

Revenant au développement (III-3.25), le dernier terme, contenant la somme infinie, doit être calculé numériquement. L'intégrant se présente sous la forme d'une somme infinie multipliée par un facteur algébrique polynômial : pour effectuer l'intégration nous avons utilisé une méthode de quadrature de Gauss à 24 points (c'est-à-dire, intégrant exactement les polynômes de degré $\leqslant 24$). Pour chacun de ces points, répartis régulièrement dans l'intervalle $]0,1[$, il faut donc calculer la série infinie :

$$\sum_{q=1}^{\infty} \frac{X^{2q}}{q(q+1)(q+\alpha)} \qquad \text{(III-3.28)}$$

Or cette somme converge dans le cas le plus défavorable (X = 1) au moins comme la série connue (93) (*) :

$$\sum_{q=1}^{\infty} q^{-3} = \zeta(3) = 1.20205\ 69031\ 59594$$

Cette propriété nous permet d'évaluer, par comparaison, la limite supérieure théorique de l'erreur commise lors de la troncature de la série.

L'ensemble des calculs décrits ci-dessus permet donc une évaluation analytique de Log $k_o$ (n, $\ell$) à l'exception d'un seul terme dont nous avons détaillé le calcul afin de montrer que l'incertitude finale sur le résultat obtenu peut être extrêmement réduite.

Cependant le calcul peut être aussi effectué entièrement nu

---

(*) Il était possible de se limiter à l'extraction de deux termes dans le développement (III-3.24). La série restante aurait alors convergé comme $\sum_{q=1}^{\infty} q^{-2} = \zeta(2)$. Nous avons préféré extraire un terme supplémentaire pour rendre la convergence plus rapide.

mériquement : la plupart des termes explicités ci-dessus pouvant être intégrés à l'aide de la méthode de quadrature de Gauss déjà mentionnée. Seuls les termes du type

$$\int_0^1 dx\, f(x)\, \mathrm{Log}\,(1-x^2)$$

nécessitent un traitement particulier : il existe des méthodes adaptées à ce genre d'intégrant présentant une singularité logarithmique (90).

Ce calcul numérique effectué indépendamment nous a donc fourni un test satisfaisant de la validité de nos résultats : les valeurs de Log $k_o$ $(n,\ell)$ obtenues par les deux méthodes coïncident toutes au moins jusqu'au douzième chiffre significatif.

Dans le tableau suivant nous avons donné la liste des résultats ainsi obtenus pour les états 1S à 4P ainsi que, pour comparaison, les valeurs calculées antérieurement par les auteurs cités au §III-2. Notons que l'incertitude sur nos valeurs peut être considérée comme étant au plus de trois unités sur le dernier chiffre.

La comparaison montre que nos données sont en très bon accord avec les résultats les plus précis de R.W. HUFF[78] et que au contraire elles diffèrent de ceux de J.M. HARRIMAN[79] de plusieurs fois l'incertitude qu'il avait prévue. La différence la plus notable est constatée pour l'état 3p où notre valeur diffère d'environ 170 fois de l'incertitude donnée par HARRIMAN. Il faut signaler cependant qu'il ne semble pas possible actuellement de mettre cette différence en évidence expérimentalement.

## III-4. CALCUL DIRECT DE Log $k_o$ $(n,\ell)$ pour $n \leq 8$

Si la méthode précédemment décrite est aisément généralisable dans son principe, aux états encore plus excités, la complexité croissante des intégrants rend le calcul quasiment inextricable, bien qu'aucune difficulté nouvelle n'apparaisse. Or notre but étant d'étendre les résultats de HARRIMAN jusqu'aux états $n \leq 8$, nous avons été amené à abandonner le formalisme de la fonction de Green et à utiliser une technique entièrement

Table 3.3

| Etat | Résultats antérieurs | | ce travail |
|---|---|---|---|
| 1 S | 2.984149(3) | Ha | 2.9841285558 |
| | 2.9841285(3) | Li | |
| | 2.9841285559(3) | Hu | |
| 2 S | 2.811798(9) | Ha | 2.8117698931 |
| | 2.811769883(28) | ST | |
| | 2.8117698(3) | Li | |
| | 2.8117698932(5) | Hu | |
| 3 S | 2.767699(8) | Ha | 2.7676636125 |
| 4 S | 2.749859(6) | Ha | 2.7498118405 |
| 2 P | -0.03001637(1) | Ha | -0.0300167086 |
| | -0.030016697(12) | ST | |
| | -0.03001675(6) | Li | |
| | -0.0300167089(3) | Hu | |
| 3 P | -0.03818852(1) | Ha | -0.0381902294 |
| 4 P | -0.0419540(3) | Ha | -0.0419548946 |
| 3 D | -0.0052321(2) | Ha | -0.0052321481 |

Ha - J.M. HARRIMAN, Phys. Rev. 101,594 (1956)

ST - C. SCHWARTZ and J.J. TIEMANN, Ann. Phys. (N.Y.) 2, 178 (1959)

Li - M. LIEBER, Phys. Rev. 174, 2037 (1968)

Hu - R.W. HUFF, Phys. Rev. 186, 1387 (1969)

numérique. Cette méthode, mise au point par H.A. BETHE, L.M. BROWN et J.R. STEHN (81) et reprise par J.M. HARRIMAN (79) est basée sur l'évaluation directe de la formule de définition ( III-2.13) du Logarithme de Bethe :

$$\text{Log}\, k_0(n,\ell) = \frac{n^3}{8} \sum_{n',\ell',m'} |\langle n\ell 0 | \vec{p} | n'\ell'm' \rangle|^2 \Omega(n,n') \text{Log} |\Omega(n,n')| \quad \text{(III-4.1)}$$

où nous avons posé $\Omega(n,n') = E_{n'} - E_n = \frac{1}{n^2} - \frac{1}{n'^2}$ , les énergies étant exprimées en Rydbergs.

Cette expression peut être modifiée formellement en introduisant les forces d'oscillateur moyennes (cf. Réf. 20 § 61α)

$$f(n,\ell;n') = \frac{2}{3} \Omega(n,n') \sum_{\ell'} \sum_{m'} |\langle n\ell 0 | \vec{r} | n'\ell'm' \rangle|^2 \quad \text{(III-4.2)}$$

et en utilisant la relation :

$$|\langle n\ell m | \vec{p} | n'\ell'm' \rangle|^2 = \Omega^2(n,n') |\langle n\ell m | \vec{r} | n'\ell'm' \rangle|^2 \quad \text{(III-4.3)}$$

on obtient une expression équivalente de Log $k_o$ $(n,\ell)$ :

$$\text{Log}\, k_0(n,\ell) = \frac{3n^3}{16} \sum_{n'} f(n,\ell;n') \Omega^2(n,n') \text{Log} |\Omega(n,n')| \quad \text{(III-4.4)}$$

A la suite des auteurs précédemment cités, nous définissons les quantités :

$$g(n,\ell;n') = \frac{3n^3}{16} f(n,\ell;n') \Omega^2(n,n') \quad \text{(III-4.5)}$$

d'où :

$$\text{Log}\, k_0(n,\ell) = \sum_{n'} g(n,\ell;n') \text{Log} |\Omega(n,n')| \quad \text{(III-4.6)}$$

L'intérêt essentiel de l'introduction des forces d'oscillateur et des quantités $g(n,\ell\,;\,n')$ réside dans le fait qu'elles vérifient des règles de sommes bien connues qui fournissent un bon test de la validité des calculs numériques. Nous reviendrons plus en détail sur ce point dans le paragraphe (III-6.).

## III-5. CALCUL DES FORCES D'OSCILLATEURS

A partir de la relation de définition (III-4.2) et après avoir effectué l'intégration angulaire, on obtient l'expression suivante de la force d'oscillateur $f(n,\ell\,;\,n')$

$$f(n,\ell;n') = \frac{1}{3(2\ell+1)} \left[ \ell \left| \mathcal{R}^{n',\ell-1}_{n,\ell} \right|^2 + (\ell+1) \left| \mathcal{R}^{n',\ell+1}_{n,\ell} \right|^2 \right] \Omega(n,n') \quad \text{(III-5.1)}$$

avec $\mathcal{R}_{n,\ell}^{n',\ell'} = \int_0^\infty dr\, r^3\, R_{n,\ell}(r)\, R_{n',\ell'}(r)$ (III-5.2)

où les fonctions $R_{n,\ell}(r)$ sont les fonctions d'ondes coulombiennes radiales ( III-3.5).

On a successivement :

$$g(n\ell;n') = \frac{n^3}{16(2\ell+1)}\left[\ell\,|\mathcal{R}_{n,\ell}^{n',\ell-1}|^2 + (\ell+1)\,|\mathcal{R}_{n,\ell}^{n',\ell+1}|^2\right]\Omega^3(n,n') \quad \text{(III-5.3)}$$

puis :

$$\mathrm{Log}\, k_0(n,\ell) = \sum_{n'=1}^{\infty} g_{n\ell,n'}\, \mathrm{Log}\,|\Omega_{n,n'}| + \int_{n^{-2}}^{\infty} d\Omega\, \frac{dg(n\ell;\eta)}{d\Omega}\, \mathrm{Log}\,|\Omega| \quad \text{(III-5.4)}$$

où nous avons explicité les contributions respectives du spectre discret et du spectre continu. Dans cette expression $d\,g\,(n,l\,;\eta)\,/\,d\Omega$ représente la valeur de $g\,(n,l\,;\eta)$ par intervalle d'unité d'énergie et $\eta$ correspond au changement de variable $n' = i\eta = i\,(E)^{-1/2}$, E représentant l'énergie de l'électron appartenant au continuum.

Le calcul repose donc essentiellement sur l'évaluation des éléments de matrice radiaux $\mathcal{R}_{n,\ell}^{n',\ell'}$ (cf. Eq. III-5.2.) correspondant à des transitions entre deux états liés ou entre un état lié et le continum. Ces intégrales sont bien connues et leur calcul est effectué à partir de la formule de W. GORDON (91) ou de ses variantes. Dans les paragraphes suivants, nous décrirons la démarche suivie pour déterminer les contributions respectives des états des parties discrète et continue du spectre.

## III-5.A CONTRIBUTION DES ETATS DISCRETS

La formule de GORDON (91) relative à une transition entre deux états liés peut être écrite sous la forme suivante :

$$\mathcal{R}_{n,\ell}^{n',\ell-1} = \frac{(-1)^{n'-\ell}}{4(2\ell-1)!}\left[\frac{(n+\ell)!\,(n'+\ell-1)!}{(n-\ell-1)!\,(n'-\ell)!}\right]^{1/2}\left[\frac{4nn'}{(n-n')^2}\right]^{\ell+1}\left(\frac{n-n'}{n+n'}\right)^{n+n'} \quad \text{(III-5.5)}$$

$$\times\left\{F_{21}\left(-n_r,-n'_r;2\ell;-\frac{4nn'}{(n-n')^2}\right) - \left(\frac{n-n'}{n+n'}\right)^2 {}_2F_1\left(-n_r-2,-n'_r;2\ell;\frac{-4nn'}{(n-n')^2}\right)\right\}$$

pour le passage de l'état $(n,\ell)$ à l'état $(n',\ell-1)$ (*). Dans

---

(*) Pour obtenir la formule correspondant à une transition $(n,\ell)\to(n',\ell+1)$, il suffit d'échanger n et n' et de remplacer $\ell$ par $\ell+1$

cette expression, on a introduit les nombres quantiques réduits : $n_r = n - \ell - 1$ et $n'_r = n' - \ell$ ; on remarque d'autre part que les fonctions hypergéométriques de Gauss ${}_2F_1$ impliquées sont en fait des polynômes de degrés inf. $(n_r, n'_r)$ et inf. $(n_r + 2, n'_r)$.

Bien entendu cette formule est valable quel que soit le couple (n,n') considéré. Cependant, pour les grandes valeurs de n' le calcul numérique demande beaucoup de temps et surtout l'évaluation des polynômes devient moins précise (il apparaît en effet des opérations d'addition et de soustraction de grands nombres voisins). Il est donc préférable d'utiliser, pour $n' \to \infty$, une forme asymptotique de la formule de Gordon.

Le comportement asymptotique du terme multiplicatif de l'expression (III-5.5) est aisément obtenu ; quant aux fonctions hypergéométriques, l'application du processus de confluence (cf. Réf. 26, § 6.1) fait apparaître des fonctions hypergéométriques confluentes. En effet en posant $z = \frac{x}{b}$ dans la fonction ${}_2F_1(a, b ; c ; z)$ on obtient pour le passage à la limite $b \to \infty$ :

$$\lim.(b \to \infty)\ {}_2F_1\left(a, b ; c ; \frac{x}{b}\right) = {}_1F_1(a ; c ; x) \qquad \text{(III-5.6)}$$

L'application de cette formule aux fonctions ${}_2F_1$ figurant dans l'expression (III-5.5) conduit à des fonctions ${}_1F_1$ indépendantes de n' et l'on a, tous calculs faits :

$$\lim.(n' \to \infty)\ \mathcal{R}^{n',\ell-1}_{n,\ell} \simeq \frac{(-1)^{n-\ell}}{4(2\ell-1)!}\left[\frac{(n+\ell)!}{(n-\ell-1)!}\right]^{1/2} (4n)^{\ell+1}\, e^{-2n}\, n'^{-3/2}\left[{}_1F_1(-n_r ; 2\ell ; 4n) - {}_1F_1(n_r - 2 ; 2\ell ; 4n)\right] \qquad \text{(III-5.7)}$$

Cette expression avait été obtenue auparavant par B.H. ARMSTRONG et H.P. KELLY (92) (*).

Cette analyse asymptotique mène au résultat intéressant suivant : en première approximation, les éléments de matrices $\mathcal{R}^{n',\ell'}_{n,\ell}$ varient comme $n'^{-3/2}$ lorsque $n' \to \infty$. Par conséquent les forces d'oscillateur $f(n,\ell ; n')$ et $g(n,\ell ; n')$ varient asymptotiquement proportionnellement à $n'^{-3}$ et, en particulier on peut écrire:

$$g(n\ell ; n') \simeq A(n,\ell)\, n'^{-3} \qquad \text{(III-5.8)}$$

---

(*) Signalons cependant que, par suite d'une erreur typographique, le signe des variables des fonctions ${}_1F_1$ est faux dans leur article.

le coefficient A $(n, \ell)$ pouvant être calculé exactement à partir de l'expression (III-5.3) et de la forme asymptotique (III-5.7).

Il est possible d'améliorer encore l'évaluation de la contribution des états $(n' \to \infty)$. En effet, une analyse plus poussée du comportement asymptotique de l'élément de matrice $\mathcal{R}^{n',\ell'}_{n,\ell}$ (III-5.5) montre que le terme suivant du développement en puissances croissantes de $\frac{1}{n'}$ est proportionnel à $n'^{-5/2}$. Ceci entraîne que l'on doive ajouter un terme supplémentaire proportionnel à $n'^{-5}$, dans le développement de $g\ (n, \ell\ ;\ n')$ pour $n' \to \infty$:

$$g(n,\ell;n') \simeq A(n,\ell)\, n'^{-3} + B(n,\ell)\, n'^{-5} \qquad \text{(III-5.9)}$$

Malheureusement, il ne semble pas possible de donner une expression analytique simple et générale du coefficient B $(n,\ell)$: il est plus aisé d'en obtenir la valeur numérique. Pour cela, il suffit de calculer $g\ (n, \ell\ ;\ n')$ à l'aide de la formule exacte de Gordon, pour quelques valeurs élevées de n'; puis, connaissant A $(n, \ell)$, déterminé précédemment, de déduire B $(n, \ell)$ en identifiant dans (III-5.9). Dans le tableau (3.4) nous donnons les valeurs de ces coefficients ainsi obtenus. La comparaison avec les résultats correspondants de Harriman, montrerait que nos valeurs coïncident avec les siennes, calculées pour tous les états jusqu'à 4P .

Notons d'autre part que la connaissance de ces coefficients présente un intérêt double. Non seulement elle permet une évaluation rapide et simple des quantités $g\ (n, \ell\ ;\ n')$ ou des forces d'oscillateurs pour les n' élevées. Mais de plus, lorsqu'on doit calculer des sommes infinies portant sur ces grandeurs, elle fournit une méthode élégante pour l'évaluation de la contribution globale des grandes valeurs de n' (pour fixer les idées $n' \geqslant 100$ par exemple). En effet, cette contribution globale peut être estimée avec une bonne précision par comparaison avec les séries connues (93):

$$\sum_{n'=1}^{\infty} n'^{-3} = \zeta(3) = 1,20205\ 69031\ 596$$

$$\sum_{n'=1}^{\infty} n'^{-5} = \zeta(5) = 1,03692\ 77551\ 437 \qquad \text{(III-5.10)}$$

Avant d'en terminer avec ce type de calculs, signalons que la méthode décrite ci-dessus permet bien sûr d'obtenir, pour les forces d'oscillateurs f $(n,\ell ; n')$ ou pour les quantités $\mathcal{R}_{n,\ell}^{n',\ell'}$, des expressions similaires qui sont d'un grand intérêt en astrophysique. En particulier, les données de H.A. BETHE et E.E. SALPETER (20) pour les états n = 1,2 ont été étendues aux états n = 3, 4 par G.S. KHANDELWAL et E.E. FITCHARD (94) en 1972 : le développement en puissances croissantes de $\frac{1}{n'}$ pour $\left|\mathcal{R}_{n,\ell}^{n',\ell'}\right|^2$ est donné jusqu'au terme en $n'^{-9}$ (!!).

III-5.B CONTRIBUTION DES ETATS DU CONTINUUM.

Là encore, le calcul repose sur l'évaluation des éléments de matrice $\mathcal{R}_{n,\ell}^{i\eta,\ell'}$, où $\eta = (E)^{-1/2}$, E étant l'énergie de l'électron dans le continuum. Il suffit donc en principe d'effectuer un prolongement analytique de la formule de GORDON (III-5.5). Cette démarche intuitive, présente cependant un inconvénient pour le calcul numérique : en effet l'introduction de variables complexes complique et rend moins précise l'évaluation numérique. Or les éléments de matrice $\mathcal{R}_{n,\ell}^{i\eta,\ell'}$ sont des quantités réelles (*), fonctions de la variable imaginaire $i\eta$. Ce fait a incité W.J. KARZAS et R. LATTER (95) à rechercher une expression équivalente de $\mathcal{R}_{n,\ell}^{i\eta,\ell'}$ exprimée à l'aide de variables réelles. Le principe de leur méthode est le suivant: après avoir effectué le prolongement analytique indiqué ci-dessus, on récrit la formule de GORDON en introduisant la variable réelle $\varepsilon = \eta / n$. Il apparaît alors que la partie complexe de l'élément de matrice $\mathcal{R}_{n,\ell}^{i\eta,\ell'}$ s'exprime sous la forme d'une combinaison linéaire de polynômes en $\varepsilon$ dont le caractère réel est démontré (95)

$$G_\ell(-m;\eta;\varepsilon) = (1-i\varepsilon)^{2m}\, {}_2F_1\left(-m, \ell - i\eta; 2\ell; -4i\varepsilon(1-i\varepsilon)^{-2}\right) \qquad \text{(III-5.11)}$$

Sachant que les fonctions ${}_2F_1$ sont solutions de l'équation différentielle hypergéométrique (26) pour la variable $z = -4i\varepsilon(1-i\varepsilon)^{-2}$,

---

(*) Il est relativement facile de s'en assurer en effectuant le changement $n' = i\eta$ dans (III-5.5) et en montrant que :

$$\mathcal{R}_{n,\ell}^{i\eta,\ell'} = \left(\mathcal{R}_{n,\ell}^{i\eta,\ell'}\right)^*$$

il est possible de trouver l'équation différentielle pour la variable $e$, dont $G_\ell$ est la solution polynomiale régulière. On obtient ainsi :

$$G_\ell(-m;\eta;e) = \sum_{s=0}^{2m} b_s e^s \qquad \text{(III-5.12)}$$

où les coefficients $b_s$ vérifient la relation de récurrence :

$$b_s = -\frac{1}{s(2\ell+s+1)}\left[4\eta(s-1-m)\,b_{s-1} + (2m+2-s)(2\ell+2m+1-s)\,b_{s-2}\right]$$

avec : $b_0 = 1$ ; $b_1 = 2m\eta/\ell$ et $b_{m+q} = (-1)^q b_{m-q}$ (III-5.13)

cette dernière relation d'antisymétrie facilitant le calcul numérique. La formule de Gordon devient alors, pour la transition $\ell \to \ell - 1$ :

$$\mathcal{R}^{\eta,\ell-1}_{n,\ell} = -\frac{2^{2\ell}}{(2\ell-1)!}\left[\frac{(n+\ell)!}{(n-\ell-1)!}\prod_{t=1}^{\ell-1}\frac{(t^2+\eta^2)}{(1-e^{-2\pi\eta})}\right]^{1/2}\eta^2\exp(2\eta\,\mathrm{Arctg}\,e-\eta\pi)\frac{e^{\ell+1}}{(1+e^2)^n}$$

$$\times\left[G_\ell(\ell+1-n;\eta;e) - (1+e^2)^{-2}\,G_\ell(\ell-1-n;\eta;e)\right] \qquad \text{(III-5.14)}$$

et pour la transition $\ell \to \ell + 1$ :

$$\mathcal{R}^{\eta,\ell+1}_{n,\ell} = \frac{2^{2\ell+3}}{(2\ell+1)!}\left[\frac{(n+\ell)!}{(n-\ell-1)!}\prod_{t=1}^{\ell+1}\frac{(t^2+\eta^2)}{(1-e^{-2\pi\eta})}\right]^{1/2}\eta^3\exp(2\eta\,\mathrm{Arctg}\,e-\eta\pi)\frac{e^{\ell+2}}{(1+e^2)^{n+1}}$$

$$\times\left[(\ell+1)^2+\eta^2\right]\left[(\ell+1-n)\,G_{\ell+1}(\ell+1-n;\eta;e) + \frac{(\ell+1+n)}{(1+e^2)}\,G_{\ell+1}(\ell-n;\eta;e)\right] \qquad \text{(III-5.15)}$$

Nous avons donné la forme explicite de $\mathcal{R}^{\eta,\ell+1}_{n,\ell}$ car elle ne peut être obtenue de manière simple à partir de la précédente.

Là encore ces formules permettent en principe le calcul exact de $\mathcal{R}^{\eta,\ell'}_{n,\ell}$ quel que soit le couple $(n,\eta)$. Mais pour les grandes valeurs de $\eta$ il est préférable, pour les mêmes raisons que celles invoquées pour les transitions discrètes (n,n'), d'utiliser des formes asymptotiques. On montre aisément que le développement des forces d'oscillateurs $f(n,\ell;\eta)$ et $g(n,\ell;\eta)$ en puissances décroissantes de $\eta$ est similaire à (III-5.9). En particulier les coefficients $A(n,\ell)$ et $B(n,\ell)$ du développement de $g(n,\ell;\eta)$ sont les mêmes que ceux du développement de $g(n,\ell;$

au signe près, compte tenu du prolongement analytique $n' \to i\eta$ .

III-6 - CALCULS NUMERIQUES

Le calcul numérique du logarithme de Bethe est effectué à partir de la formule (III-5.4). Notons cependant que, dans le but d'obtenir une indication sur la précision de nos calculs, nous avons utilisé le fait que les forces d'oscillateur, $f(n,\ell ; n')$ et $g(n,\ell ; n')$, vérifient des règles de sommes bien connues (20), (96). Nous avons donc évalué simultanément, pour tous les états $(n,\ell)$ considérés, les sommes suivantes :

$$\sum_{n'} f(n,\ell ; n') = 1 \qquad \text{(III-6.1)}$$

$$\sum_{n'} g(n,\ell ; n') = \delta_{\ell,0} \qquad \text{(III-6.2)}$$

$$\sum_{n'} g(n,\ell ; n') \log |n^{-2} - n'^{-2}| = \log k_0(n,\ell) \qquad \text{(III-6.3)}$$

L'incertitude subsistante sur $\log k_0(n,\ell)$ pouvait donc être aisément déterminée, connaissant la précision avec laquelle les règles de sommes étaient satisfaites.

Compte tenu des résultats du paragraphe précédent, on voit que l'on peut distinguer quatre parties dans le calcul numérique selon les valeurs respectives des paramètres n' et $\eta$ :

a) - faibles valeurs de n' ($\leq 100$ par exemple) (*) : on utilise alors, pour les éléments de matrices $\mathcal{R}$ , la formule de Gordon (III-5.5).

b) - grandes valeurs de n' ($\geq 100$ par exemple) (*) : on utilise les développements asymptotiques du type (III-5.9) et la comparaison avec les fonctions $\zeta(3)$ et $\zeta(5)$ de RIEMANN.

---

(*) Cette valeur n'est donnée qu'à titre indicatif : nous avons vérifié que le résultat final ne dépendait pas de cette limite arbitraire pourvu qu'elle ne soit ni trop grande ni trop petite.

c) - petites valeurs de $\varrho = \eta/n$ ($\lesssim 30$ par exemple) (*) ; selon que l'on s'intéresse aux règles de sommes (III-6.1), (III-6.2) ou à $\mathrm{Log}\, k_o\,(n,\ell)$ on a à calculer des intégrales se ramenant aux types respectifs suivants :

$$\int_0^x d\varrho \frac{df}{d\varrho} \; ; \; \int_0^x d\varrho \frac{dg}{d\varrho} \quad \text{et} \quad \int_0^x d\varrho \, \mathrm{Log}\, \varrho \; h(\varrho) \qquad \text{(III-6.4)}$$

où les fonctions $df/d\varrho$, $dg/d\varrho$ et $h(\varrho)$ sont régulières dans l'intervalle considéré. Nous avons utilisé les méthodes de quadrature de Gauss mentionnées au § III-3. Dans cet intervalle, les éléments de matrice $\mathcal{R}$ entrant dans l'intégrant étaient calculés à partir des expressions (III-5.13) ou (III-5.14)

d) - grandes valeurs de $\varrho = \eta/n$ ($> 30$ par exemple) (*) ; dans ce domaine, le calcul peut être effectué analytiquement à partir des expressions asymptotiques des intégrants. Ces expressions étant de la forme générale (III-5.9), il est aisé d'obtenir la valeur exacte de l'intégrale.

Dans le tableau suivant, nous donnons les résultats numériques obtenus pour les différentes sommes, en faisant apparaître pour chaque état initial considéré les contributions respectives du spectre discret et du continuum. Il est intéressant de comparer ces résultats avec ceux du tableau (3.3) pour les états 1S à 4P : on constate que l'accord est excellent, ce qui permet de penser que, pour les états plus excités, nos valeurs sont sûres.

## III-7. CONCLUSION

Dans ce chapitre nous avons développé un ensemble de calculs donnant le Logarithme de Bethe pour les états $n \lesssim 8$. Cette étude nous a permis de mettre en évidence les avantages et les limitations du formalisme de la fonction de Green coulombienne lorsque celle ci est donnée sous la forme intégrale proposée par L. HOSTLER . L'avantage essentiel réside dans le fait que cette représentation permet l'obtention aisée des formes analytiques exactes des éléments de matrices du second ordre, autorisan

---

(*) voir note page précédente.

une évaluation très précise du logarithme de Bethe. Cependant, la complication croissante des calculs nous a confronté à des difficultés quasiment insurmontables pour étendre notre méthode aux états très excités ($n > 4$). Tout en notant une certaine simplification par rapport aux techniques quadridimensionnelles, décrites au chapitre II, ce progrès s'est révélé insuffisant pour que la méthode puisse être qualifiée de complètement générale.

Pour étendre nos résultats jusqu'aux états $n = 8$, nous avons donc eu recours aux techniques purement numériques. Nous pensons avoir montré que nous avons amélioré la méthode de J.M. HARRIMAN : la précision des résultats ainsi obtenus supporte la comparaison, lorsqu'elle est possible ($n \leq 4$) avec les résultats analytiques.

Quant aux applications, il est intéressant d'observer que ces données sont utiles pour obtenir, par comparaison avec l'expérience, une bonne estimation des termes d'ordres élevés contribuant au déplacement de Lamb dans l'hydrogène (97). Cette comparaison permet également de contrôler la validité du calcul des corrections radiatives de niveaux d'énergie excités dans les atomes "exotiques" : nous citerons l'exemple des niveaux $n = 4,5$ du plomb muonique (98), (177).

Nous ne voudrions pas abandonner le thème du déplacement de Lamb sans mentionner les perspectives ouvertes par notre travail. En effet, comme nous l'avons déjà signalé les progrès actuels de la spectroscopie atomique et les mesures de plus en plus fines effectuées sur les états excités des systèmes non hydrogénoïdes, réclament la connaissance du déplacement de Lamb (*) pour ces états. Comme les alcalins sont parmi les systèmes atomiques les plus étudiés, nous pensons que la suite naturelle de notre travail consisterait à adapter le formalisme développé ici à l'étude de ces systèmes.

---

(*) ainsi que du déplacement par irradiation lumineuse non résonante (light-shift) dont le calcul, quoique plus simple, s'apparente formellement à celui du Lamb-shift. Ce "light-shift" peut devenir notable pour les spectroscopies dans lequelles le système étudié est éclairé par un faisceau laser intense (voir ci-dessous le paragraphe V-7).

TABLEAU 3.4

| L=0 | | F | G | LOG $K_o$ | $K_o$ |
|---|---|---|---|---|---|
| N=1 | (D) | .5650041 | .0676578 | -.0144949 | |
| | (C) | .4349958 | .9323422 | 2.9986234 | |
| | | 1.0000000 | 1.0000000 | 2.9841285 | 19.7693 |
| N=2 | (D) | .6489076 | .0264336 | -.0464679 | |
| | (C) | .3510924 | .9735664 | 2.8582378 | |
| | | 1.0000000 | 1.0000000 | 2.8117699 | 16.6393 |
| N=3 | (D) | .7094742 | .0113209 | -.0329799 | |
| | (C) | .2905258 | .9886791 | 2.8006435 | |
| | | 1.0000000 | 1.0000000 | 2.7676636 | 15.9214 |
| N=4 | (D) | .7502905 | .0038251 | -.0198043 | |
| | (C) | .2497095 | .9961749 | 2.7696162 | |
| | | 1.0000000 | 1.0000000 | 2.7498118 | 15.6397 |
| N=5 | (D) | .7791573 | -.0005313 | -.0095917 | |
| | (C) | .2208427 | 1.0005313 | 2.7504154 | |
| | | 1.0000000 | 1.0000000 | 2.7408237 | 15.4997 |
| N=6 | (D) | .8005782 | -.0033268 | -.0017964 | |
| | (C) | .1994218 | 1.0033268 | 2.7374606 | |
| | | 1.0000000 | 1.0000000 | 2.7356642 | 15.4200 |
| N=7 | (D) | .8171097 | -.0052472 | .0042459 | |
| | (C) | .1828903 | 1.0052472 | 2.7281832 | |
| | | 1.0000000 | 1.0000000 | 2.7324291 | 15.3702 |
| N=8 | (D) | .8302738 | -.0066340 | .0090247 | |
| | (C) | .1697262 | 1.0066340 | 2.7212425 | |
| | | 1.0000000 | 1.0000000 | 2.7302673 | 15.3370 |

Logarithme de Bethe Log $K_o(n,\ell)$ et vérification numérique des règles de sommes $f(n,\ell\,;n') = 1$ et $g(n,\ell\,;n') = \delta_{\ell,0}$ ;

ETATS S

| L=0 | A | B |
|---|---|---|
| N=1 | .293050 | .195 |
| N=2 | .343514 | .114 |
| N=3 | .390182 | .110 |
| N=4 | .433492 | .267 |
| N=5 | .474123 | .660 |
| N=6 | .512589 | 1.356 |
| N=7 | .549268 | 2.421 |
| N=8 | .584441 | 3.920 |

Coefficients du développement asymptotique $g(n,\ell\,;n') = A(n,\ell)\,n'^{-3} + B(n,\ell)\,n'^{-5}$

ETATS S

TABLEAU 3.4 (Suite I)

| L=1 | | F | G | LOG $K_o$ | $K_o$ |
|---|---|---|---|---|---|
| N=2 | (D) | .8092545 | -.0813841 | -.0306459 | |
| | (C) | .1907455 | .0813841 | .0006292 | |
| | | 1.0000000 | -.0000000 | -.0300167 | .9704 |
| N=3 | (D) | .7860331 | -.1010367 | -.0097536 | |
| | (C) | .2139669 | .1010367 | -.0284367 | |
| | | 1.0000000 | -.0000000 | -.0381902 | .9625 |
| N=4 | (D) | .7916841 | -.1094929 | .0062678 | |
| | (C) | .2083159 | .1094929 | -.0482227 | |
| | | 1.0000000 | .0000000 | -.0419549 | .9589 |
| N=5 | (D) | .8032206 | -.1140980 | .0176858 | |
| | (C) | .1967794 | .1140980 | -.0617205 | |
| | | 1.0000000 | .0000000 | -.0440347 | .9569 |
| N=6 | (D) | .8151858 | -.1169525 | .0260443 | |
| | (C) | .1848142 | .1169525 | -.0713565 | |
| | | 1.0000000 | .0000000 | -.0453122 | .9557 |
| N=7 | (D) | .8261793 | -.1188741 | .0323690 | |
| | (C) | .1738207 | .1188741 | -.0785241 | |
| | | 1.0000000 | .0000000 | -.0461552 | .9549 |
| N=8 | (D) | .8359274 | -.1202443 | .0372960 | |
| | (C) | .1640726 | .1202443 | -.0840374 | |
| | | 1.0000000 | .0000000 | -.0467413 | .9543 |

Logarithme de Bethe Log $K_o(n,\ell)$ et vérification numérique des règles de sommes $\sum_{n'} f(n,\ell;n') = 1$ et $\sum_{n'} g(n,\ell;n') = \delta_{\ell,0}$;

ETATS P

| L=1 | A | B |
|---|---|---|
| N=2 | .314888 | 1.338 |
| N=3 | .403454 | 1.594 |
| N=4 | .458086 | 1.829 |
| N=5 | .502109 | 2.239 |
| N=6 | .541282 | 2.922 |
| N=7 | .577633 | 3.956 |
| N=8 | .612066 | 5.409 |

Coefficients du développement asymptotique

$g(n,\ell;n') = A(n,\ell)\, n'^{-3} + B(n,\ell)\, n'^{-5}$

ETATS P

TABLEAU 3.4 (suite 2)

| L=2 | | F | G | LOG $K_o$ | $K_o$ |
|---|---|---|---|---|---|
| N=3 | (D) | .9041590 | -.0185932 | .0187530 | |
| | (C) | .0958410 | .0185932 | -.0239851 | |
| | | 1.0000000 | -.0000000 | -.0052321 | .9948 |
| N=4 | (D) | .8645949 | -.0272786 | .0357790 | |
| | (C) | .1354051 | .0272786 | -.0425200 | |
| | | 1.0000000 | -.0000000 | -.0067409 | .9933 |
| N=5 | (D) | .8498839 | -.0319873 | .0478444 | |
| | (C) | .1501161 | .0319873 | -.0554451 | |
| | | 1.0000000 | .0000000 | -.0076008 | .9924 |
| N=6 | (D) | .8459883 | -.0348633 | .0565581 | |
| | (C) | .1540117 | .0348633 | -.0647053 | |
| | | 1.0000000 | .0000000 | -.0081472 | .9919 |
| N=7 | (D) | .8469628 | -.0367732 | .0630714 | |
| | (C) | .1530372 | .0367732 | -.0715907 | |
| | | 1.0000000 | .0000000 | -.0085192 | .9915 |
| N=8 | (D) | .8501368 | -.0381203 | .0680962 | |
| | (C) | .1498632 | .0381203 | -.0768812 | |
| | | 1.0000000 | .0000000 | -.0087850 | .9913 |

Logarithme de Bethe Log $K_o$ $(n, \ell)$ et vérification numérique des règles de sommes $\sum_{n'} f(n, \ell ; n') = 1$ et $\sum_{n'} g(n, \ell ; n') = \delta_{\ell,0}$ ;

ETATS D

| L=2 | A | B |
|---|---|---|
| N=3 | .280294 | 3.636 |
| N=4 | .415628 | 5.278 |
| N=5 | .497059 | 6.335 |
| N=6 | .555331 | 7.329 |
| N=7 | .602071 | 8.499 |
| N=8 | .642353 | 9.986 |

Coefficients du développement asymptotique $g(n, \ell ; n') = A(n, \ell) n'^{-3} + B(n, \ell) n'^{-5}$

ETATS D

TABLEAU 3.4 (suite 3)

| L=3 | | F | G | Log $K_o$ | $K_o$ |
|---|---|---|---|---|---|
| N=4 | (D) | .9502537 | -.0058633 | .0105238 | |
| | (C) | .0497463 | .0058633 | -.0122574 | |
| | | 1.0000000 | -.0000000 | -.0017337 | .9983 |
| N=5 | (D) | .9154375 | -.0100334 | .0212198 | |
| | (C) | .0845625 | .0100334 | -.0234220 | |
| | | 1.0000000 | .0000000 | -.0022022 | .9978 |
| N=6 | (D) | .8947947 | -.0128101 | .0296414 | |
| | (C) | .1052053 | .0128101 | -.0321436 | |
| | | 1.0000000 | .0000000 | -.0025022 | .9975 |
| N=7 | (D) | .8832767 | -.0147162 | .0361513 | |
| | (C) | .1167232 | .0147162 | -.0388604 | |
| | | 1.0000000 | .0000000 | -.0027091 | .9973 |
| N=8 | (D) | .8773133 | -.0160781 | .0412430 | |
| | (C) | .1226867 | .0160781 | -.0441021 | |
| | | 1.0000000 | .0000000 | -.0028591 | .9971 |

| L=3 | A | B |
|---|---|---|
| N=4 | .221768 | 6.402 |
| N=5 | .381084 | 10.900 |
| N=6 | .490991 | 14.052 |
| N=7 | .571227 | 16.567 |
| N=8 | .633623 | 18.892 |

| L=4 | | F | G | Log $K_o$ | $K_o$ |
|---|---|---|---|---|---|
| N=5 | (D) | .9739401 | -.0021392 | .0049387 | |
| | (C) | .0260599 | .0021392 | -.0057108 | |
| | | 1.0000000 | .0000000 | -.0007721 | .9992 |
| N=6 | (D) | .9482712 | -.0042032 | .0111869 | |
| | (C) | .0517288 | .0042032 | -.0121496 | |
| | | 1.0000000 | .0000000 | -.0009628 | .9990 |
| N=7 | (D) | .9285809 | -.0058444 | .0167873 | |
| | (C) | .0714191 | .0058444 | -.0178818 | |
| | | 1.0000000 | .0000000 | -.0010945 | .9989 |
| N=8 | (D) | .9146405 | -.0071056 | .0214979 | |
| | (C) | .0853595 | .0071056 | -.0226883 | |
| | | 1.0000000 | .0000000 | -.0011904 | .9988 |

| L=4 | A | B |
|---|---|---|
| N=5 | .162857 | 8.828 |
| N=6 | .320566 | 17.290 |
| N=7 | .447772 | 24.140 |
| N=8 | .548125 | 29.714 |

Logarithme de Bethe Log $K_o(n,\ell)$ et vérification numérique des règles de sommes $\sum_{n'} f(n,\ell;n') = 1$ et $\sum_{n'} g(n,\ell;n') = \delta_{\ell,0}$ ;

ETATS F et G

Coefficients du développement asymptotique

$g(n,\ell;n') = A(n,\ell)\, n'^{-3} + B(n,\ell)\, n'^{-5}$

ETATS F et G

TABLEAU 3.4 (suite_4)

| L=5 | | F | G | LOG $K_0$ | $K_0$ |
|---|---|---|---|---|---|
| N=6 | (D) | .9862974 | -.0008484 | .0022413 | |
| | (C) | .0137026 | .0008484 | -.0026492 | |
| | | 1.0000000 | .0000000 | -.0004079 | .9996 |
| N=7 | (D) | .9689175 | -.0018867 | .0057709 | |
| | (C) | .0310825 | .0018867 | -.0062706 | |
| | | 1.0000000 | .0000000 | -.0004997 | .9995 |
| N=8 | (D) | .9528268 | -.0028493 | .0093620 | |
| | (C) | .0471732 | .0028493 | -.0099285 | |
| | | 1.0000000 | .0000000 | -.0005665 | .9994 |

| L=6 | | F | G | LOG $K_0$ | $K_0$ |
|---|---|---|---|---|---|
| N=7 | (D) | .9927802 | -.0003552 | .0010002 | |
| | (C) | .0072199 | .0003552 | -.0012411 | |
| | | 1.0000000 | .0000000 | -.0002409 | .9998 |
| N=8 | (D) | .9815881 | -.0008830 | .0029574 | |
| | (C) | .0184119 | .0008830 | -.0032478 | |
| | | 1.0000000 | .0000000 | -.0002904 | .9997 |

| L=7 | | F | G | LOG $K_0$ | $K_0$ |
|---|---|---|---|---|---|
| N=8 | (D) | .9961904 | -.0001545 | .0004345 | |
| | (C) | .0038096 | .0001545 | -.0005884 | |
| | | 1.0000000 | .0000000 | -.0001539 | .9998 |

Logarithme de Bethe Log $K_0$ $(n, \ell)$ et vérification numérique des règles de sommes $\sum_{n'} f(n, \ell ; n') = 1$ et $\sum_{n'} g(n, \ell ; n') = \delta_{\ell,0}$;

ETATS L = 5 ; 6 ; 7.

| L=5 | A | B |
|---|---|---|
| N=6 | .113691 | 10.402 |
| N=7 | .253034 | 23.080 |
| N=8 | .383061 | 34.915 |

| L=6 | A | B |
|---|---|---|
| N=7 | .076530 | 10.992 |
| N=8 | .190324 | 27.278 |

| L=7 | A | B |
|---|---|---|
| N=8 | .050124 | 10.728 |

Coefficients du développement asymptotique
$g(n, \ell ; n') = A(n, \ell)\, n'^{-3} + B(n, \ell)\, n'^{-5}$

ETATS L=5 ; 6 ; 7.

# IIème PARTIE

# PROCESSUS D'IONISATION MULTIPHOTONIQUE

## INTRODUCTION

Le nom de MARIA GÖPPERT-MAYER (100) figure toujours au début de la bibliographie sur les processus multiphotoniques. En effet dès 1931, elle avait prévu l'existence des processus à deux photons, autres que la diffusion de la lumière, à savoir : la désexcitation d'un niveau atomique par émission simultanée de deux photons et l'excitation ou l'ionisation d'un atome par absorption simultanée de deux photons.

Pendant les trente années suivantes, on ne prêta attention qu'à la partie de ce travail de précurseur concernant la désexcitation. C'est ainsi qu'on a montré que pour les états métastables tels que l'état $2S_{1/2}$ de l'hydrogène le type de désexcitation le plus probable (E1) correspond à l'émission de deux photons (101). Historiquement, c'est en astrophysique qu'on s'est d'abord intéressé à ce phénomène car la raréfaction de l'hydrogène interstellaire permettait l'observation de ce type de désexcitation. Parallèlement aux mesures, des études théoriques ont été faites sur la durée de vie de l'état métastable $2S_{1/2}$ (101). Par la suite, les premières expériences de mesure du déplacement de Lamb, reposant sur la métastabilité de l'état $2S_{1/2}$, créèrent un regain d'intérêt pour ce type de calculs (102).

L'intérêt s'est encore accru lorsque des mesures de durées de vie d'états métastables furent possibles en laboratoire (103). Les recherches théoriques correspondantes se sont alors orientées dans deux directions complémentaires :

a) Calcul relativiste d'amplitudes de transitions radiatives à un photon et évaluation des contributions multipolaires correspondantes. Ces calculs étaient

faits principalement pour prévoir l'observation éventuelle de transitions interdites sous l'approximation dipolaire électrique non relativiste (104).

b) Calcul non relativiste de la probabilité de désexcitation par émission de deux photons, seul processus permis si l'on se restreint à l'approximation dipolaire électrique (E 1). Cette évaluation repose sur un calcul de perturbation au second ordre dont le principe a été établi par M. GOPPERT-MAYER. Le résultat le plus précis obtenu dans cette voie a été donné en 1969 par S. KLARSFELD (105) qui, ainsi que nous l'avions signalé, a utilisé le formalisme de la fonction de Green coulombienne et plus particulièrement la représentation (I-4.6) de HOSTLER. Plus récemment encore ont été publiés des résultats de calculs sur des processus de désexcitation à deux ou trois photons dans des systèmes non hydrogénoïdes (106).

Bien que le formalisme que nous avons utilisé dans ce travail nous aurait permis de mener à bien de tels calculs dans les systèmes hydrogénoïdes, nous avons préféré nous intéresser aux processus d'absorption multiphotonique mis en évidence plus récemment ; nous ne reviendrons donc pas sur les phénomènes mentionnés ci-dessus.

Si les processus de désexcitation ont été étudiés relativement tôt, ceux caractérisés par l'absorption simultanée de deux ou plusieurs photons optiques ont été longtemps considérés seulement comme une curiosité scientifique :étant donné l'intensité des sources disponibles on pouvait prévoir que les sections efficaces correspondantes seraient extrêmement faibles.

Puis le laser vint... La première mise en évidence expérimentale d'un processus d'excitation par absorption simultanée de deux photons a été obtenue en 1961 en irradiant un cristal de $CaF_2 : Eu^{2+}$ par un laser à rubis (107).

La focalisation d'un faisceau laser d'intensité suffisante dans un gaz, peut provoquer un phénomène de claquage (108). Cet effet étant observé dans un grand nombre de gaz, aussi bien aux basses pressions ($p \lesssim 10^{-3}$ torr) qu'aux pressions élevées ($p \gtrsim 10^{-1}$ torr), il était intéressant d'expliquer la formation des ions détectés. Notons que même dans le cas des hautes pressions, où un processus d'ionisation en

cascade est possible, il restait à justifier la création des particules chargées primaires à l'origine du phénomène.

Les premières tentatives d'explication théorique s'orientèrent alors dans deux directions divergentes. D'une part L.V. KELDYSH (109) proposa un processus d'ionisation par un effet tunnel induit par le champ électromagnétique associé au faisceau laser. Cette voie fut reprise et explorée par de nombreux auteurs (110). Il semble cependant que les prévisions quantitatives et qualitatives obtenues à partir de cette hypothèse ne soient pas en accord avec les résultats expérimentaux observés : voir notamment la référence (111).

L'autre voie, de loin la plus étudiée, propose une explication basée sur un processus d'ionisation consécutif à l'absorption simultanée de plusieurs photons et, suivant en cela M. GÖPPERT-MAYER, en donne une description basée sur la théorie des perturbations dépendant du temps. Nous reviendrons plus particulièrement, dans le paragraphe suivant, sur les travaux qui ont suivi cette démarche, qui est aussi la notre. Nous pouvons signaler tout de suite que la plupart des aspects qualitatifs prévus par la théorie des perturbations ont pu être observés. En particulier, la prévision selon laquelle la section efficace d'ionisation par N photons est proportionnelle à $(I)^{N-1}$, où I est l'intensité du faisceau laser incident, a pu être vérifiée dans un assez large domaine de variation de I.

Traitements perturbatifs des processus multiphotoniques

Comme nous l'avons signalé, c'est dans les solides que furent mis en évidence, pour la première fois, des processus multiphotoniques. Cette observation suscita de nombreuses études théoriques sur ce sujet (voir par exemple la bibliographie contenue dans la référence 24). Cependant compte-tenu de la complexité de la description théorique du solide, les prévisions ne pouvaient être que qualitatives et rapidement les théoriciens choisirent les systèmes atomiques plus simples comme objets de leurs méditations... Et parmi ces systèmes l'atome d'hydrogène reçut un traitement privilégié.

Dans le tableau suivant nous tentons de donner un

panorama des travaux théoriques effectués depuis 1964 dans le cadre de la théorie des perturbations.

L'examen de ce tableau appelle plusieurs commentaires que l'on peut résumer ainsi :

● Les calculs les plus complets sur la photoionisation par N photons sont sans conteste ceux de H.B. BEBB et A. GOLD, publiés dès 1966 : ces auteurs ont étudié non seulement les systèmes hydrogénoïdes mais aussi les gaz rares et les alcalins. Malheureusement leurs résultats ne sont qu'approximatifs compte tenu de la méthode employée (voir notamment la comparaison pour l'hydrogène, réf. 118).

● D'autre part on constate que les travaux de Y. GONTIER et M. TRAHIN, qui ont généralisé la méthode de W. ZERNIK, forment l'ensemble le plus cohérent pour les systèmes hydrogénoïdes. Leurs données nous ont servi de références dans notre travail.

● On peut vérifier aussi que les premières recherches utilisant le formalisme de la fonction de Green sont limitées à l'étude de processus à deux photons. Mentionnons pourtant les travaux de B.A. ZON et al. (119) qui ont tenté de généraliser cette méthode à l'étude de l'ionisation par trois photons en utilisant la représentation intégrale (I-4.6) de HOSTLER. Cependant à cause des difficultés rencontrées, ces auteurs n'ont pu effectuer le calcul à partir des expressions analytiques obtenues, et ont été contraints de revenir à une évaluation numérique des intégrales radiales. Le principe de ce calcul est décrit dans la référence (140).

L'introduction postérieure de la représentation sturmienne de la fonction de Green a permis de résoudre ce problème. Ainsi E. KARULE a pu obtenir relativement aisément une forme analytique de l'amplitude de transition pour les processus d'ordre supérieur à deux (117). Nous verrons par la suite comment nous avons obtenu, pour la première fois, des résultats numériques à l'aide de cette méthode. Ces résultats consituent pour l'instant la seule vérification indépendante des travaux de Y. GONTIER et M. TRAHIN (118) (122).

Tableau 4.1

APPLICATION DE LA THEORIE DES PERTURBATIONS
A L'ETUDE DES PROCESSUS MULTIPHOTONIQUES

SYMBOLES UTILISES

☆ Méthode de Dalgarno
★ Fonction de Green
○ Sommation réduite à quelques termes
● Dénominateurs de la série des perturbations remplacés par une énergie moyenne
H. Système hydrogénoïde
Alc. Alcalins
G.R. Gaz rares
$I^-$ Ions négatifs $I^-$
▲ Résultats numériques

| AUTEURS \ Nombre de photons impliqués | 2 | 3 | >3 | REMARQUES |
|---|---|---|---|---|
| W. ZERNIK 1964 (21) (24) | ☆ ; H. ; ▲ | | | Article fondamental pour l'utilisation de la méthode de Dalgarno. |
| H.B. BEBB et al. 1966 (112) | | ● ; H. ; ▲ | | Article de base sur l'application de la théorie des perturbations aux processus multiphotoniques |
| H. B. BEBB 1966 (113) | | ○ ; Alc. ; ▲ | | Défaut quantique |
| E.J. ROBINSON et al. 1967 (114) | ☆ ; $I^-$ ; ▲ | | | Photodétachement par deux photons dans les ions négatifs |
| Y. GONTIER et al. 1967 (25) | | ☆ ; H ; ▲ | | Première généralisation de la méthode de Dalgarno pour N > 2. |
| V.M. MORTON 1967 (115) | ○ ; H, Alc., G.e., Hg ; ▲ | | | Données pour les lasers à Rubis et au Néodyme |
| S. KLARSFLED 1969 (36) | ★ ; H. ; ▲ | | | Utilisation de la représentation (I-4.7) de Hostler. Effet de retard |
| L.P. RAPOPORT et al. 1969 (44) | ★ ; H ; ▲ | | | Représentation (I-4.6) de Hostler |
| F.T. CHAN et al. 1969 (116) | ☆ ; H ; ▲ | | | Vérification des résultats de de W. Zernik |
| E. KARULE 1971 (117) | | ★ ; H | | Fonction de Green sturmienne Pas de résultats numériques |
| Y. GONTIER et al. 1971 (118) | | ☆ ; H ; ▲ | | Rectification et généralisation des premiers résultats |
| B.A. ZON et al. 1972 (119) | | ★ ; H, He ; ▲ | | Fonction de Green phénoménologique. Défaut quantique. Effet de polarisation. |
| J. MIZUNO 1973 (120) | ☆ ; Alc. ; ▲ | | | Potentiel de Bottcher. Effet de polarisation |
| E. ARNOUS et al. 1973 (121) | ★ ; H ; ▲ | | | Représentation (I-4.6) de Hostler. Distribution angulaire des photoélectrons |
| Y. GONTIER et al. 1973 (122) | | ☆ ; H ; ▲ | | Effet de polarisation |
| Y. GONTIER et al. 1973 (10) | | ☆ ; H ; ▲ | | Etude des résonances Résultats numériques pour l'ionisation par trois photons |
| T. OHNO et al. 1973 (123) | | ○ ; Alc. ; ▲ | | Calcul approché |
| P. LAMBROPOULOS 1974 (11) | H | | | Processus résonants |
| S. KLARSFELD et al. 1974 (124) | | ★ ; H ; ▲ | | Calculs au seuil ; Effet de polarisation. Comparaison avec Reiss. |
| Ce travail | | ★ ; H ; ▲ | | Effet de polarisation. Etats excités. Fonction de Green sturmienne. |

● Il convient de signaler aussi que dans leur quasi totalité, ces travaux théoriques évaluent l'amplitude de transition du processus multiphotonique à l'ordre le plus bas, c'est-à-dire en se limitant au premier terme non nul du développement en série des perturbations. Cette description est évidemment insuffisante pour décrire certains effets observés, résultant notamment de l'influence des processus résonants. L'étude de ces phénomènes demanderait l'inclusion d'effets d'ordres supérieurs tels que les déplacements et élargissements des niveaux atomiques sous l'effet du champ lui-même (10) (11). Bien que le formalisme que nous avons mis au point permette d'étudier ces problèmes spécifiques (125), nous avons limité notre travail à l'étude des processus non résonants, les corrections résultant de ces effets restant alors négligeables.

● Enfin dans ce tableau on constate qu'à partir de 1972 apparaît la mention "Effet de Polarisation". Nous nous référons par ce terme à l'étude de l'influence de l'état de polarisation de la lumière incidente sur la valeur de la section efficace. Cet effet, caractéristique des processus multiphotoniques, a été d'abord mis en évidence expérimentalement puis étudié théoriquement par de nombreux auteurs. Nous-même avons obtenu des résultats intéressants sur ce sujet (138).

Apport de notre travail dans ce courant de recherche

Nous avons mis au point une méthode de calcul utilisant la représentation sturmienne de la fonction de Green coulombienne, qui nous semble particulièrement bien adaptée à l'évaluation des amplitudes multiphotoniques. Pour exposer nos résultats nous adopterons le plan suivant :

Dans le chapitre IV, nous expliciterons le calcul de l'amplitude puis de la section efficace d'ionisation par trois photons d'un atome d'hydrogène initialement dans un état quelconque. Ce choix est justifié par les raisons suivantes : les processus à deux photons ayant été étudiés en détail par de nombreux auteurs, le passage à trois photons représente la généralisation immédiate de ces travaux. Ensuite comme nous le montrerons,

l'extension aux plus grands nombres de photons ne posera plus de problèmes nouveaux, sinon de programmation.

Dans le chapitre V, nous montrerons que notre technique nous a permis de confirmer les résultats de Y. GONTIER et M. TRAHIN, pour les états initiaux 1S et 2S pour les processus d'ionisation impliquant jusqu'à 8 photons. Puis nous étudierons pour les états plus excités, l'effet de polarisation ci-dessus mentionné, afin de déterminer les efficacités relatives des états de polarisation circulaire et linéaire de la lumière incidente. En particulier, nous rendrons compte de notre étude au seuil de photoionisation par $N \leqslant 8$ photons (*) et nous comparerons nos résultats avec ceux obtenus par H.R. REISS (126) dans le cadre de sa théorie non perturbative (cf. § V-8 ).

Enfin, pour terminer, nous donnerons la valeur de la section efficace d'ionisation par 12 photons ($\lambda = 10600 \text{Å}$) d'un atome d'hydrogène dans l'état fondamental. Ce calcul a été effectué en vue d'une éventuelle comparaison avec le résultat d'une expérience qui utiliserait un laser au néodyme . A notre connaissance c'est la première fois que l'on obtient un résultat pour un ordre de non-linéarité aussi élevé à l'aide d'un calcul "exact" dans le cadre de la théorie des perturbations.

---

(*) Lorsque l'énergie du photoélectron tend vers zéro, la section efficace reste finie, comme pour l'effet photoélectrique simple (voir par exemple l'étude de E.P. WIGNER, Phys. Rev. 73 , 1002 (1948)).

# CHAPITRE IV

# IONISATION DE L'ATOME D'HYDROGENE PAR TROIS PHOTONS

Dans ce chapitre, nous décrirons successivement les calculs de l'amplitude de transition, puis de la section efficace relatives à l'ionisation par trois photons de l'atome d'hydrogène dans un état initial quelconque.

Avant d'aborder le calcul proprement dit, nous nous sommes posé le problème du choix de la forme du hamiltonien d'interaction la mieux adaptée à notre calcul. Nous avons alors été amené à montrer l'équivalence rigoureuse, dans les limites de l'approximation dipolaire, des expressions usuelles en représentation $\vec{r}$ et $\vec{p}$.

Revenant à l'amplitude de transition, on peut distinguer deux phases successives dans le cours de ce calcul. La première correspond à l'évaluation de la partie angulaire : la forme de celle-ci dépend de l'état de polarisation de la lumière incidente et nous étudierons donc cet effet. La seconde phase concerne la partie radiale que l'on calcule en introduisant la représentation sturmienne (I-5.14) de la fonction de Green coulombienne.

Il est aisé ensuite d'obtenir une valeur numérique de la section efficace dont nous donnerons alors la variation en fonction de la longueur d'onde du rayonnement incident.

## IV - 1. EQUIVALENCE DES DIFFERENTES FORMES DU HAMILTONIEN D'INTERACTION DANS LE CALCUL DES AMPLITUDES MULTIPHOTONIQUES .

- A l'occasion de calculs d'amplitudes de transitions radiatives dans l'approximation dipolaire, le problème du choix

de la forme du hamiltonien décrivant l'interaction entre le système atomique et le champ électromagnétique a été souvent évoqué (127) (128). En effet, on peut montrer que sous certaines conditions, le hamiltonien d'interaction entre le champ et un électrons atomique peut s'écrire sous l'une ou l'autre des deux formes équivalentes suivantes :

$$H_{int} = -\frac{e}{mc}\vec{A}.\vec{p} + \frac{e^2}{2mc^2}A^2 \qquad \text{(IV-1.1)}$$

$$H'_{int} = -e\vec{E}.\vec{r} \qquad \text{(IV-1.2)}$$

Dans ces expressions $\vec{p}$ et $\vec{r}$ représentent l'impulsion et la position de l'électron atomique, en interaction avec le champ électromagnétique quantifié caractérisé par son potentiel vecteur $\vec{A}$ ou par le champ électrique $\vec{E}$.

- On montre qu'il est possible de passer d'une forme à l'autre à l'aide d'une transformation unitaire laissant invariante la matrice S. (127) (148). Rappelons que cette équivalence n'est établie que dans les limites de validité de l'approximation dipolaire. Il existe d'autres conditions restrictives moins sévères : nous renvoyons le lecteur aux articles regroupés dans la référence (127); voir également (148) pour une analyse plus détaillée.

- Cette équivalence a été vérifiée directement à l'aide d'un raisonnement purement algébrique dans le calcul d'amplitudes de transitions radiatives du premier et du second ordre. Pour le premier ordre il n'y a pas de difficulté. Pour le second ordre, le principe de la démonstration a été proposé par P.A.M. DIRAC (131), puis repris dans de nombreux traités (voir notamment la référence (132) ch.13) A notre connaissance l'extension de cette vérification n'a pas été tentée pour les ordres plus élevés. Nous expliciterons ci-après la démonstration de cette équivalence pour un processus d'absorption de trois photons. Comme nous le verrons, cette démonstration nous a permis d'obtenir incidemment quelques règles de sommes vérifiées par les éléments de matrice de transition.

Avant de passer au cas à trois photons, nous rappelons le principe du raisonnement pour le cas de l'absorption de deux

photons car certains intermédiaires de calcul nous seront utiles par la suite. Après avoir extrait les coefficients communs aux deux amplitudes on est amené à montrer l'équivalence des deux expressions suivantes

$$\mathcal{M}^{(2)}_{f/i} = \sum_1 \frac{(p)_{f1}\,(p)_{1i}}{E_i + \omega - E_1} \qquad \text{(IV-1.3)}$$

$$\mathcal{M}'^{(2)}_{f/i} = (i\omega)^2 \sum_1 \frac{(r)_{f1}\,(r)_{1i}}{E_i + \omega - E_1} \qquad \text{(IV-1.4)}$$

où : l'indice 1 caractérise les états intermédiaires appartenant au spectre complet du système atomique ; nous avons posé $p = \vec{p}\,.\vec{\varepsilon}^{(*)}$, $r = \vec{r}\,.\vec{\varepsilon}$ et introduit la notation abrégée $(p)_{ij}$ , $(r)_{ij}$ pour les éléments de matrices $\langle i|p|j\rangle$ et $\langle i|r|j\rangle$. Nous traitons, par commodité, le cas où les deux photons absorbés appartiennent au même mode du champ. Cette condition n'est pas restrictive : on obtiendrait un résultat similaire pour deux modes quelconques du champ.

Le raisonnement repose sur l'application de la formule suivante où $H_o$ est le hamiltonien atomique non perturbé :

$$i[H_o, r]_{jk} \equiv i(E_j - E_k)(r)_{jk} = (p)_{jk} \qquad \text{(IV-1.5)}$$

L'application de cette formule permet de transformer l'expression de $\mathcal{M}^{(2)}_{f/i}$ :

$$\mathcal{M}^{(2)}_{f/i} = (i)^2 \sum_1 (E_f - E_1)(E_1 - E_i)\,\frac{(r)_{f1}\,(r)_{1i}}{x_1} \qquad \text{(IV-1.6)}$$

où nous avons posé, pour simplifier l'écriture, $x_1 = E_i + \omega - E_1$

En utilisant la relation de conservation de l'énergie globale : $E_f = E_i + 2\omega$ on transforme de nouveau l'expression de $\mathcal{M}^{(2)}_{f/i}$ :

$$\mathcal{M}^{(2)}_{f/i} = \mathcal{M}'^{(2)}_{f/i} - \sum_1 x_1\,(r)_{f1}\,(r)_{1i} \qquad \text{(IV-1.7)}$$

(*) $\vec{\varepsilon}$ représente le vecteur polarisation du mode considéré.

Pour obtenir le résultat cherché, il suffit de montrer que le dernier terme du second membre est identiquement nul. Pour cela on utilise la relation de conservation de l'énergie pour récrire $x_1$ :

$$x_1 = E_i + \omega - E_1 = \frac{1}{2}(E_f - 2E_1 + E_i) = \frac{1}{2}\left[(E_f - E_1) - (E_1 - E_i)\right] \quad \text{(IV-1.8)}$$

dans le but de faire apparaître le commutateur de r et p :

$$\sum_1 x_1 (r)_{f1} (r)_{1i} = -\frac{i}{2} \quad [p,r]_{fi} = -\frac{1}{2} \quad \delta_{f,i} \quad \text{(IV-1.9)}$$

ce qui démontre au passage la règle de somme du second ordre suivante :

$$\sum_1 (E_f - 2E_1 + E_i)(r)_{f1}(r)_{1i} = - \quad \delta_{f,i} \quad \text{(IV-1.10)}$$

Le dernier terme de (IV-1.7) est donc nul et l'équivalence des deux formes de $H_{int}$ est démontrée pour ce processus d'absorption de deux photons.

L'extension de ce résultat au cas de l'absorption de trois photons est basée sur la même démarche : on doit démontrer l'égalité des deux expressions réduites suivantes ;

$$\mathcal{M}^{(3)}_{fi} = \sum_{1,2} \frac{(p)_{f2}(p)_{21}(p)_{1i}}{x_2 x_1} = \left(\frac{i}{}\right)^3 \sum_{2,1} (E_f - E_2)(E_2 - E_1)(E_1 - E_i) \frac{(r)_{f2}(r)_{21}(r)_{1i}}{x_2 x_1} \quad \text{(IV-1.11)}$$

$$\mathcal{M}'^{(3)}_{fi} = \left(i\omega\right)^3 \sum_{1,2} \frac{(r)_{f2}(r)_{21}(r)_{1i}}{x_2 x_1} \quad \text{(IV-1.12)}$$

où $x_2 = E_i + 2\omega - E_2$ et $x_1 = E_i + \omega - E_1$ (IV-1.13)

Tenant compte de la relation de conservation de l'énergie globale $E_f = E_i + 3\omega$ on récrit $\mathcal{M}^{(3)}_{fi}$ :

$$\mathcal{M}^{(3)}_{fi} = \mathcal{M}'^{(3)}_{fi} + \left(\frac{i}{}\right)^3 \left\{ \omega \sum_{1,i} (x_1 x_2 - x_1^2 - x_2^2) \frac{(r)_{f2}(r)_{21}(r)_{1i}}{x_2 x_1} + \sum_{1,2} (x_1 - x_2)(r)_{f2}(r)_{21}(r)_{1i} \right\} \quad \text{(IV-1.14)}$$

Par ce procédé on fait apparaître $\mathcal{M}^{(3)}_{fi}$ sous la forme d'un développement en puissances de $\omega$. Le terme en $\omega^3$ est égal à $\mathcal{M}'^{(3)}_{fi}$. On doit donc montrer que les autres coefficients du développement sont identiquement nuls.

Il n'apparaît pas de terme en $\omega^2$ dans (IV-1.14) car

le coefficient correspondant s'annule identiquement pour des raisons purement algébriques. Cette propriété est d'ailleurs vérifiée, plus généralement, pour le coefficient d'ordre N-1 dans le développement correspondant à un processus "à N photons".

Pour démontrer que le coefficient du terme linéaire en $\omega$ est nul, il suffit de le transformer de la manière suivante :

$$\sum_{1,2} (x_1 x_2 - x_1^2 - x_2^2) \frac{(r)_{f2}(r)_{21}(r)_{1i}}{x_2 x_1} = \frac{1}{2} \sum_{1,2} \left[ \frac{x_2 - 2x_1}{x_2} + \frac{x_1 - 2x_2}{x_1} \right] (r)_{f2}(r)_{21}(r)_{1i} \quad \text{(IV-1.15)}$$

ou encore, d'après les définitions de $x_1$, $x_2$ et la relation de conservation de l'énergie :

$$= -\frac{1}{2} \sum_{1,2} \left[ \frac{E_2 - 2E_1 + E_i}{E_i + 2\omega - E_2} + \frac{E_1 - 2E_2 + E_f}{E_i + \omega - E_1} \right] (r)_{f2}(r)_{21}(r)_{1i} \quad \text{(IV-1.16)}$$

puis appliquant la "règle de somme" du second ordre (IV-1.10), il vient :

$$= \frac{1}{2} \left\{ \sum_2 \frac{\delta_{2,i}(r)_{f2}}{E_i + 2\omega - E_2} + \sum_1 \frac{\delta_{f,1}(r)_{1i}}{E_i + \omega - E_1} \right\}$$

$$= \frac{1}{2} \left[ \frac{(r)_{fi}}{2\omega} - \frac{(r)_{fi}}{2\omega} \right] = 0 \quad \text{(IV-1.17)}$$

Quant au dernier terme, on le récrit sous la forme suivante :

$$\sum_{1,2} (x_1 - x_2)(r)_{f2}(r)_{21}(r)_{1i} = \frac{1}{3} \sum_{1,2} (E_i - 3E_1 + 3E_2 - E_f)(r)_{f2}(r)_{21}(r)_{1i} \quad \text{(IV-1.18)}$$

et utilisant encore la "règle de somme" (IV-1.10), on aboutit au résultat cherché :

$$= -\frac{1}{3} \left[ \sum_2 (r)_{f2} \delta_{2,i} - \sum_1 (r)_{1i} \delta_{f,1} \right] = 0 \quad \text{(IV-1.19)}$$

Notons que cette dernière relation et la précédente représentent une généralisation de la règle de somme (IV-1.10), puisqu'on obtient le résultat "au troisième ordre" suivant :

$$\sum_{1,2} (E_f - 3E_2 + 3E_1 - E_i)(r)_{f2}(r)_{21}(r)_{1i} = 0 \quad \text{(IV-1.20)}$$

Par ce procédé nous avons démontré l'équivalence rigoureuse des expressions $M_{fi}^{(3)}$ et $M_{fi}^{\prime(3)}$. Par ailleurs, nous avons pu étendre ces résultats au cas de l'absorption simultanée de trois photons appartenant à des modes différents du champ.

L'extension des résultats exposés ci-dessus aux processus impliquant un plus grand nombre de photons a été effectuée par Y. HENO (133) qui a pu obtenir des résultats généraux valables quel que soit l'ordre du processus d'absorption considéré.

Pour en revenir à notre calcul proprement dit, nous nous sommes placé dans l'espace des positions et avons donc utilisé la représentation en $\vec{\varepsilon} \cdot \vec{r}$ du Hamiltonien d'interaction. Nous explicitons ci-après le calcul de l'amplitude de transition.

## IV - 2. L'AMPLITUDE DE TRANSITION ET L'EFFET DE POLARISATION

Dans le cadre du formalisme exposé ci-dessus, la section efficace différentielle d'ionisation par trois photons revêt la forme suivante (voir l'appendice pour l'introduction des unités atomiques)

$$\frac{d\sigma}{d\Omega(\hat{k})} = \frac{\alpha}{2\pi} a_0^2 \left(\frac{I}{2I_0}\right)^2 \omega k \left| \mathcal{M}^{(3)}_{f/i} \right|^2 \qquad \text{(IV-2.1)}$$

où $\alpha$ est la constante de structure fine ; I l'intensité du faisceau lumineux incident exprimé en watts/cm$^2$ ; $I_0$ est l'unité atomique d'intensité lumineuse = 7,019 $10^{16}$ watts/cm$^2$ ; $a_0$ est le rayon de la première orbite de Bohr et k est l'impulsion du photoélectron émis dans la direction du vecteur unitaire $\hat{k}$ et dont la valeur est donnée par la relation de conservation de l'énergie :

$$\frac{k^2}{2} = E_i + 3\omega \qquad \text{(IV-2.2)}$$

$E_i$ est l'énergie de l'atome dans l'état initial et $\omega$ l'énergie de chacun des photons incidents.

L'élément de matrice du troisième ordre $\mathcal{M}^{(3)}_{f/i}$ correspondant à l'amplitude de transition de l'atome entre l'état initial $|i\rangle$ et l'état final $|f\rangle$ appartenant au continuum, s'écrit sous la forme :

$$\mathcal{M}^{(3)}_{f/i} = \sum_{s_1, s_2} \frac{\langle f | \vec{\varepsilon}.\vec{r} | s_2 \rangle \langle s_2 | \vec{\varepsilon}.\vec{r} | s_1 \rangle \langle s_1 | \vec{\varepsilon}.\vec{r} | i \rangle}{(E_i + 2\omega - E_{s_2})(E_i + \omega - E_{s_1})} \qquad \text{(IV-2.3)}$$

où $\vec{\varepsilon}$ est le vecteur polarisation du mode considéré.

Jusqu'en 1972, les auteurs travaillant sur les processus multiphotoniques choisissaient par commodité un état de polarisation linéaire. Ce choix avait l'avantage d'être adapté à la comparaison avec l'expérience, car le rayonnement laser utilisé était polarisé linéairement. Sans doute abusé par le fait que l'état de polarisation de la lumière n'influe pas sur la valeur de la section efficace dans le cas de l'effet photoélectrique "simple", l'existence d'un effet de polarisation n'avait été envisagé qu'incidemment dans les travaux théoriques (110) (119).

Le progrès vint de l'expérience... En 1971, R.A. FOX, R.M. KOGAN et E.J. ROBINSON (135) constatèrent que la section efficace d'ionisation par trois photons, d'atomes de césium était différente selon l'état de polarisation de la lumière incidente. La valeur mesurée du rapport des sections efficaces montrait que pour ce processus particulier, la lumière polarisée circulairement se révélait plus efficace que la lumière polarisée linéairement :

$$\frac{\sigma'}{\sigma} = \frac{\text{section efficace totale, polarisation circulaire}}{\text{section efficace totale, polarisation linéaire}} = 2{,}15 \pm 0{,}4$$

Ce résultat inattendu a priori fut confirmé par des mesures subséquentes, effectuées par la même équipe (136), concernant l'ionisation par deux photons du césium. Le rapport des sections efficaces était $\frac{\sigma'}{\sigma} = 1{,}28 \pm 0{,}2$, cette fois-ci encore, favorable à la polarisation circulaire.

Une interprétation théorique de ces résultats fut proposée peu après par P. LAMBROPOULOS (137) et par nous-même (138). Dans la présentation de cet exposé, nous traiterons donc successivement le cas de la polarisation linéaire et celui de la polarisation circulaire.

Dans l'expression (IV-2.3) de $\mathcal{M}^{(3)}_{fi}$, le système atomique est supposé initialement dans un état lié quelconque $|i\rangle = |n,l,m\rangle = R_{n,l}(r)\, Y_{l,m}(\hat{r})$. (*) Les états intermédiaires $|s_i\rangle$ appartiennent à l'ensemble complet des états propres du hamiltonien atomique non perturbé : $|s_i\rangle = |\nu_i \lambda_i \mu_i\rangle = R_{\nu_i \lambda_i}(r)\, Y_{\lambda_i \mu_i}(\hat{r})$
La fonction d'onde de l'état final, appartenant au continuum,

(*) $\hat{r} = \dfrac{\vec{r}}{r}$

est donnée par le développement en ondes partielles suivant :

$$|f\rangle = |\vec{k}\rangle = \left(\frac{8\pi^3}{k}\right)^{1/2} \sum_{L=0}^{\infty} i^L e^{-i\eta_L} R_{k,L}(r) \sum_{M=-L}^{+L} Y_{L,M}(\hat{r})\, Y^*_{L,M}(\hat{k}) \qquad \text{(IV-2.4)}$$

qui se comporte asymptotiquement comme la superposition d'une "onde plane" d'amplitude unité et d'une onde sphérique entrante (134). Dans cette expression $\eta_L = \arg\Gamma\left(L+1-\frac{i}{k}\right)$ est le déphasage coulombien et $R_{k,l}(r)$ est la fonction d'onde radiale (20).

Nous donnons ci-après les détails du calcul des parties angulaires pour les états de polarisation linéaire et circulaire.

## IV-3. PARTIE ANGULAIRE ; POLARISATION LINEAIRE

Un choix adéquat de l'orientation des axes de référence simplifie notablement le calcul (x). Dans notre cas particulier, il convient d'orienter l'axe polaire Oz parallèlement au vecteur unitaire de polarisation $\vec{\varepsilon}$ du rayonnement incident, se propageant selon la direction Oy par exemple.

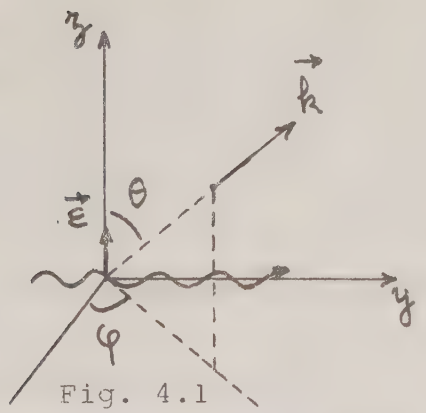



Fig. 4.1

Système de coordonnées utilisé dans le cas de la polarisation linéaire.

Dans ce repère, les angles $\theta$, $\varphi$ définissent la direction du photoélectron par rapport au vecteur de L'opérateur d'interaction dipolaire s'écrit alors sous la forme simple suivante :

$$\vec{\varepsilon}.\vec{r} = \left(\frac{4\pi}{3}\right)^{1/2} r\, Y_{1,0}(\hat{r}) \qquad \text{(IV-3.1)}$$

En remplaçant dans l'expression (IV-2.3) de $\mathcal{M}^{(3)}_{f/i}$, on obtient :

$$\mathcal{M}^{(3)}_{f/i} = \left(\frac{8\pi^3}{k}\right)^{1/2} \sum_{L,M} (-i)^L e^{i\eta_L} Y_{L,M}(\hat{k}) \sum_{\lambda_1\mu_1\lambda_2\mu_2} \left(\frac{4\pi}{3}\right)^{3/2} \qquad \text{(IV-3.2)}$$

$$\times \langle Y_{LM}|Y_{10}|Y_{\lambda_2\mu_2}\rangle \langle Y_{\lambda_2\mu_2}|Y_{10}|Y_{\lambda_1\mu_1}\rangle \langle Y_{\lambda_1\mu_1}|Y_{10}|Y_{\ell m}\rangle T_{\lambda_1\lambda_2 L}(\omega)$$

---

(x) Comparer par exemple la forme des distributions angulaires pour deux photons données par W. ZERNIK (24) avec la forme obtenue par E. ARNOUS et al. (121) ; voir également la référence (119).

où la partie radiale de l'amplitude $T_{\lambda_1 \lambda_2 L}(\omega)$ a la forme développée suivante.

$$T_{\lambda_1 \lambda_2 L}(\omega) = \sum_{\nu_1, \nu_2} \frac{\langle R_{k,L} | r | R_{\nu_2 \lambda_2} \rangle \langle R_{\nu_2 \lambda_2} | r | R_{\nu_1 \lambda_1} \rangle \langle R_{\nu_1 \lambda_1} | r | R_{n\ell} \rangle}{(E_n + 2\omega - E_{\nu_2})(E_n + \omega - E_{\nu_1})} \quad \text{(IV-3.3)}$$

Nous expliciterons le calcul de cette amplitude réduite dans le § (IV-5 ). Revenant à la partie angulaire, telle qu'elle apparait sous la forme (IV-3.2), on constate qu'il est nécessaire d'évaluer des intégrales sur un produit de trois harmoniques sphériques. Le résultat en est connu et peut être exprimé en fonction des symboles 3-j de WIGNER (139) :

$$\left(\frac{4\pi}{3}\right)^{1/2} \langle Y_{\lambda\mu} | Y_{10} | Y_{\ell m} \rangle = (-1)^{-\mu} [(2\lambda+1)(2\ell+1)]^{1/2} \begin{pmatrix} \lambda & 1 & \ell \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \lambda & 1 & \ell \\ -\mu & 0 & m \end{pmatrix} \quad \text{(IV-3.4)}$$

Les propriétés des symboles 3-j, découlant de celles du couplage des moments angulaires, imposent les règles de sélection suivantes :

$$\lambda = \ell \pm 1 \quad ; \quad \mu = m \quad \text{(IV-3.5)}$$

Ceci entraine que le photoélectron ne puisse occuper que les états de moments angulaires L suivants :

$$L = \ell - 3,\ \ell - 1\ ,\ \ell + 1,\ \ell + 3\ ;\ L \geq 0 \quad \text{(IV-3.6)}$$

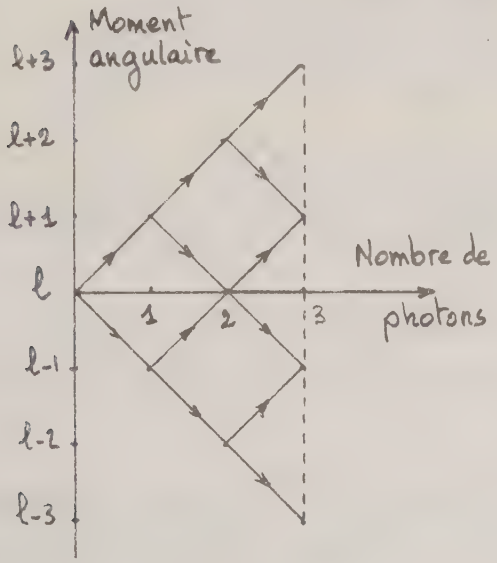



Fig. 4.2

comme on peut le vérifier sur la figure ci-contre, donnant le moment angulaire du système en fonction du nombre de photons absorbés, ainsi que les différentes voies permettant d'atteindre un état donné.

Cette circonstance permet de décomposer l'élément de matrice initial en quatre parties correspondant respectivement aux quatre états finals accessibles :

$$\mathcal{M}^{(3)}_{fi} = \left(\frac{8\pi^3}{k}\right)^{1/2} \left[ M_{\ell-3} + M_{\ell-1} + M_{\ell+1} + M_{\ell+3} \right] \quad \text{(IV-3.7)}$$

La forme explicite de la partie angulaire des éléments $M_L$ est obtenue en remplaçant les symboles 3-j de Wigner par leurs valeurs calculées (139). On aboutit aisément à l'expression générale :

$$\left(\frac{4\pi}{3}\right)^{1/2} \langle Y_{\lambda m} | Y_{10} | Y_{\ell m} \rangle = \left[\frac{\ell_>^2 - m^2}{(2\ell+1)(2\lambda+1)}\right]^{1/2} \qquad \text{(IV-3.8)}$$

avec $\lambda = \ell \pm 1$ et $\ell_> = \sup(\lambda, \ell)$

A partir de cette formule, on obtient les expressions suivantes des amplitudes $M_L$ :

$$M_{\ell+3} = (-i)^{\ell+3} e^{i\eta_{\ell+3}} Y_{\ell+3,m}(\hat{k}) \left[\frac{((\ell+1)^2-m^2)((\ell+2)^2-m^2)((\ell+3)^2-m^2)}{(2\ell+1)(2\ell+3)^2(2\ell+5)^2(2\ell+7)}\right]^{1/2} T_{\ell+1,\ell+2,\ell+3}(\omega)$$

$$M_{\ell+1} = (-i)^{\ell+1} e^{i\eta_{\ell+1}} Y_{\ell+1,m}(\hat{k}) \left\{ \left[\frac{(\ell+1)^2-m^2}{(2\ell+1)(2\ell+3)}\right]^{3/2} T_{\ell+1,\ell,\ell+1}(\omega) \right.$$
$$\left. + \left[\frac{((\ell+1)^2-m^2)((\ell+2)^2-m^2)^2}{(2\ell+1)(2\ell+3)^3(2\ell+5)^2}\right]^{1/2} T_{\ell+1,\ell+2,\ell+1}(\omega) + \left[\frac{(\ell^2-m^2)^2((\ell+1)^2-m^2)}{(2\ell-1)^2(2\ell+1)^3(2\ell+3)}\right]^{1/2} T_{\ell-1,\ell,\ell+1}(\omega) \right\}$$

$$M_{\ell-1} = (-i)^{\ell-1} e^{i\eta_{\ell-1}} Y_{\ell-1,m}(\hat{k}) \left\{ \left[\frac{(\ell^2-m^2)((\ell+1)^2-m^2)^2}{(2\ell-1)(2\ell+1)^3(2\ell+3)^2}\right]^{1/2} T_{\ell+1,\ell,\ell-1}(\omega) \right.$$
$$\left. + \left[\frac{\ell^2-m^2}{(2\ell-1)(2\ell+1)}\right]^{3/2} T_{\ell-1,\ell,\ell-1}(\omega) + \left[\frac{(\ell^2-m^2)((\ell-1)^2-m^2)^2}{(2\ell-3)^2(2\ell-1)^3(2\ell+1)}\right]^{1/2} T_{\ell-1,\ell-2,\ell-1}(\omega) \right\}$$

$$M_{\lambda-3} = (-i)^{\ell-3} e^{i\eta_{\ell-3}} Y_{\ell-3,m}(\hat{k}) \left[\frac{(\ell^2-m^2)((\ell-1)^2-m^2)((\ell-2)^2-m^2)}{(2\ell-5)(2\ell-3)^2(2\ell-1)^2(2\ell+1)}\right]^{1/2} T_{\ell-1,\ell-2,\ell-3}(\omega)$$

(IV-3.9)

La section efficace totale d'ionisation par trois photons d'un état quelconque $(n, \ell)$ peut être obtenue de la manière suivante. On remplace les éléments $M_L$, par leurs expressions ci-dessus, dans (IV-3.7) puis dans la formule (IV-2.1) donnant la section efficace différentielle. On intègre

ensuite cette dernière sur la direction de propagation du photoélectron : les intégrales se ramènent aux intégrales habituelles d'orthonormalisation des fonctions $Y_{\ell,m}(\theta,\varphi)$. Enfin, pour un atome non polarisé dans l'état initial, on effectue la moyenne sur le nombre quantique magnétique m, en supposant que les sous niveaux magnétiques ont la même population :

$$\sigma_{n,\ell} = \frac{1}{2\ell+1} \sum_{m=-\ell}^{+\ell} \sigma_{n\ell m} \qquad \text{(IV-3.10)}$$

Plus concrètement, la somme sur les valeurs de m est obtenue en utilisant les résultats connus (89)

$$\frac{1}{2\ell+1} \sum_{m=-\ell}^{+\ell} m^2 = \frac{1}{3}\ell(\ell+1)$$

$$\frac{1}{2\ell+1} \sum_{m=-\ell}^{+\ell} m^4 = \frac{1}{15}\ell(\ell+1)(3\ell^2+3\ell-1) \qquad \text{(IV-3.11)}$$

$$\frac{1}{2\ell+1} \sum_{m=-\ell}^{+\ell} m^6 = \frac{1}{21}\ell(\ell+1)(3\ell^4+6\ell^3-3\ell+1)$$

Après un calcul assez fastidieux, on obtient l'expression cherchée :

$$\sigma_{n,\ell} = 4\pi^2 \alpha a_0^2 \omega \left(\frac{I}{2I_0}\right)^2 \frac{1}{105} \left\{ \frac{6(\ell+1)(\ell+2)(\ell+3)}{(2\ell+1)(2\ell+3)(2\ell+5)} \left| T_{\ell+1,\ell+2,\ell+3}(\omega) \right|^2 \right.$$

$$+ \frac{(\ell+1)(24\ell^4+96\ell^3+150\ell^2+108\ell+35)}{(2\ell+1)^3(2\ell+3)^2} \left| T_{\ell+1,\ell,\ell+1}(\omega) \right|^2 + \frac{2(\ell+1)(\ell+2)(6\ell^2+25\ell+28)}{(2\ell+1)(2\ell+3)^2(2\ell+5)} \left| T_{\ell+1,\ell+2,\ell+1}(\omega) \right|^2$$

$$+ \frac{2\ell(\ell+1)(6\ell^2-\ell+2)}{(2\ell-1)(2\ell+1)^3} \left| T_{\ell-1,\ell,\ell+1}(\omega) \right|^2 + \frac{4\ell(\ell+1)(6\ell^2+13\ell+9)}{(2\ell+1)^3(2\ell+3)} \mathrm{Re}\left[ T_{\ell+1,\ell,\ell+1}(\omega) T^*_{\ell-1,\ell,\ell+1}(\omega) \right]$$

$$+ \frac{4(\ell+1)(\ell+2)(6\ell^2+11\ell+7)}{(2\ell+1)^2(2\ell+3)^2} \mathrm{Re}\left[ T_{\ell+1,\ell,\ell+1}(\omega) T^*_{\ell+1,\ell+2,\ell+1}(\omega) \right] + \frac{\ell(24\ell^4+6\ell^2+5)}{(2\ell-1)^2(2\ell+1)^3} \left| T_{\ell-1,\ell,\ell-1} \right|^2$$

$$+ \frac{12\ell(\ell+1)(\ell+2)}{(2\ell+1)^2(2\ell+3)} \mathrm{Re}\left[ T_{\ell-1,\ell,\ell+1}(\omega) T^*_{\ell+1,\ell+2,\ell+1}(\omega) \right]$$

$$+ \frac{2\ell(\ell-1)(6\ell^3-13\ell+9)}{(2\ell-3)(2\ell-1)^2(2\ell+1)} \left| T_{\ell-1,\ell-2,\ell-1}(\omega) \right|^2 + \frac{2\ell(\ell+1)(6\ell^2+13\ell+9)}{(2\ell+1)^3(2\ell+3)} \left| T_{\ell+1,\ell,\ell-1}(\omega) \right|^2$$

.../...

$$+\frac{4\ell(\ell-1)(6\ell^2+\ell+2)}{(2\ell-1)^2(2\ell+1)^2}\,\mathrm{Re}\left[T_{\ell-1,\ell,\ell-1}(\omega)\,T^{*}_{\ell-1,\ell-2,\ell-1}(\omega)\right]$$

$$+\frac{4\ell(\ell+1)(6\ell^2-\ell+2)}{(2\ell+1)^3(2\ell-1)}\,\mathrm{Re}\left[T_{\ell-1,\ell,\ell-1}(\omega)\,T^{*}_{\ell+1,\ell,\ell-1}(\omega)\right]$$

$$+\frac{12\ell(\ell-1)(\ell+1)}{(2\ell-1)(2\ell+1)^2}\,\mathrm{Re}\left[T_{\ell-1,\ell-2,\ell-1}(\omega)\,T^{*}_{\ell+1,\ell,\ell-1}(\omega)\right] \qquad \text{(IV-3.12)}$$

$$+\frac{6\ell(\ell-1)(\ell-2)}{(2\ell-3)(2\ell-1)(2\ell+1)}\,\left|T_{\ell-1,\ell-2,\ell-3}(\omega)\right|^2$$

## IV-4 PARTIE ANGULAIRE ; POLARISATION CIRCULAIRE

Dans le cas où le rayonnement incident est polarisé circulairement, il convient d'effectuer le choix suivant pour l'orientation du système de référence (138) (121) : on oriente l'axe polaire Oz parallèlement à la direction de propagation du photon incident que l'on supposera par exemple dans un état de polarisation circulaire droite tel que

$$\vec{\mathcal{E}}^{(+)} = -\frac{1}{\sqrt{2}}\left(\vec{\mathcal{E}}_x + i\,\vec{\mathcal{E}}_y\right) \qquad \text{(IV-4.1)}$$

L'opérateur d'interaction dipolaire prend alors la forme particulièrement simple :

$$\vec{\mathcal{E}}.\vec{r} = -\left(\frac{4\pi}{3}\right)^{1/2} r\, Y_{1,1}(\hat{r}) \qquad \text{(IV-4.2)}$$

et l'amplitude de transition s'écrit :

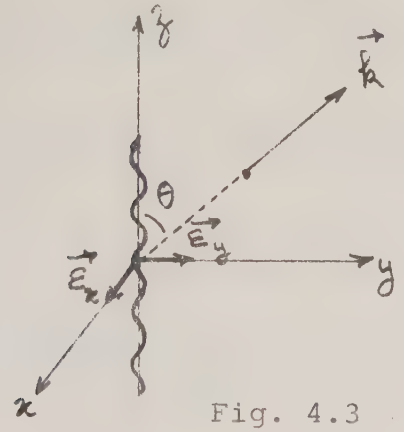



Fig. 4.3
Système de coordonnées dans le cas de la polarisation circulaire.

$$\mathcal{T}^{(3)}_{f\leftarrow i} = -\left(\frac{8\pi^3}{k}\right)^{1/2}\sum_{L,M}(-i)^L e^{i\eta_L}\,Y_{L,M}(\hat{k})\sum_{\lambda_2\mu_2}\sum_{\lambda_1\mu_1}\left(\frac{4\pi}{3}\right)^{3/2} \qquad \text{(IV-4.3)}$$

$$\times\,\langle Y_{LM}\,|\,Y_{11}\,|\,Y_{\lambda_2\mu_2}\rangle\langle Y_{\lambda_2\mu_2}\,|\,Y_{11}\,|\,Y_{\lambda_1\mu_1}\rangle\langle Y_{\lambda_1\mu_1}\,|\,Y_{11}\,|\,Y_{\ell m}\rangle\,\overline{T}_{\lambda_1\lambda_2 L}(\omega)$$

avec les mêmes notations que dans la formule (IV-3.2) ci-dessus. En remplaçant les intégrales sur les harmoniques sphériques par leurs expressions en fonction des symboles 3-j :

$$\left(\frac{4\pi}{3}\right)^{1/2}\langle Y_{\lambda\mu}\,|\,Y_{11}\,|\,Y_{\ell m}\rangle = (-1)^{\mu}\left[(2\lambda+1)(2\ell+1)\right]^{1/2}\begin{pmatrix}\lambda & 1 & \ell\\ 0 & 0 & 0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\lambda & 1 & \ell\\ -\mu & 1 & m\end{pmatrix} \qquad \text{(IV-4.4)}$$

on obtient les règles de sélection suivantes :

$$\lambda = \ell \pm 1 \quad ; \mu = m+1 \qquad \text{(IV-4.5)}$$

La règle concernant le nombre quantique magnétique est plus restrictive quant aux voies accessibles que dans le cas de la polarisation linéaire. Par exemple, il apparait immédiatement qu'à partir d'un état initial S ($\ell$=o) on ne pourra atteindre qu'un état final F ($\ell$ = 3, m = 3). D'autre part, on peut vérifier que, sauf pour un état initial de moment angulaire $\ell \geq 3$, le nombre d'états finals et de chemins accessibles est plus restreint que pour la polarisation linéaire.

Cette circonstance est fondamentalement à l'origine de la différence d'efficacité constatée entre les deux états de polarisation (119) (121) (138). Nous y reviendrons lors de la généralisation de ces résultats au cas de l'ionisation par N photons (N $\geq$ 3).

Revenant au problème à trois photons, l'évaluation de la partie angulaire est effectuée à l'aide des formules spécialisées suivantes, valables respectivement pour les transitions $\ell \to \ell + 1$ ( m $\to$ m + 1) et $\ell \to \ell - 1$ ( m $\to$ m + 1)

$$\left(\frac{4\pi}{3}\right)^{1/2} \langle Y_{\ell+1,m+1} | Y_{11} | Y_{\ell m} \rangle = \left[\frac{(\ell+1+m)(\ell+2+m)}{2(2\ell+1)(2\ell+3)}\right]^{1/2} \qquad \text{(IV-4.6)}$$

$$\left(\frac{4\pi}{3}\right)^{1/2} \langle Y_{\ell-1,m+1} | Y_{11} | Y_{\ell m} \rangle = -\left[\frac{(\ell-m)(\ell+1-m)}{2(2\ell-1)(2\ell+1)}\right]^{1/2} \qquad \text{(IV-4.7)}$$

En remplaçant dans (IV-4.3), on obtient, pour chaque état final accessible, les formes des éléments $M'_L$ dont la définition est analogue à celle des éléments $M_L$ introduits dans le paragraphe précédent, Eq. (IV-3 .7):

$$M'_{\ell+3} = (-i)^{\ell+3} e^{i\eta_{\ell+3}} Y_{\ell+3,m+3}(\hat{k}_2) \left[\frac{(\ell+1+m)(\ell+2+m)(\ell+3+m)(\ell+4+m)(\ell+5+m)(\ell+6+m)}{8(2\ell+1)(2\ell+3)^2(2\ell+5)^2(2\ell+7)}\right]^{1/2} T_{\ell+1,\ell+2,\ell+3}(\omega)$$

$$M'_{\ell+1} = (-i)^{\ell+1} e^{i\eta_{\ell+1}} Y_{\ell+1,m+3}(\hat{k}) \left[\frac{(\ell-1-m)(\ell-m)(\ell+1+m)(\ell+2+m)(\ell+3+m)(\ell+4+m)}{8(2\ell+1)(2\ell+3)}\right]^{1/2}$$
$$\times \left[\frac{T_{\ell-1,\ell,\ell+1}(\omega)}{(2\ell-1)(2\ell+1)} + \frac{T_{\ell+1,\ell+2,\ell+1}(\omega)}{(2\ell+3)(2\ell+5)} + \frac{T_{\ell+1,\ell,\ell+1}(\omega)}{(2\ell+1)(2\ell+3)}\right]$$

$$M'_{\ell-1} = (-i)^{\ell-1} e^{i\eta_{\ell-1}} Y_{\ell-1,m+3}(\hat{k}) \left[\frac{(\ell-3-m)(\ell-2-m)(\ell-1-m)(\ell-m)(\ell+1+m)(\ell+2+m)}{8(2\ell-1)(2\ell+1)}\right]^{1/2}$$
$$\times \left[\frac{T_{\ell-1,\ell,\ell-1}(\omega)}{(2\ell-1)(2\ell+1)} + \frac{T_{\ell-1,\ell-2,\ell-1}(\omega)}{(2\ell-3)(2\ell-1)} + \frac{T_{\ell+1,\ell,\ell-1}(\omega)}{(2\ell+1)(2\ell+3)}\right]$$

$$M'_{\ell-3} = (-i)^{\ell-3} e^{i\eta_{\ell-3}} Y_{\ell-3,m+3}(\hat{k}) \left[\frac{(\ell-5-m)(\ell-4-m)(\ell-3-m)(\ell-2-m)(\ell-1-m)(\ell-m)}{8(2\ell-5)(2\ell-3)^2(2\ell-1)^2(2\ell+1)}\right]^{1/2} T_{\ell-1,\ell-2,\ell-3}(\omega)$$

(IV-4.8)

La section efficace totale $\sigma'_{n,\ell}$ est obtenue de la même manière que précédemment pour la polarisation linéaire et l'on a, tous calculs faits :

$$\sigma'_{n,\ell} = 4\pi^2 a_0^2 \alpha \omega \left(\frac{I}{2I_0}\right)^2 \frac{1}{7} \left\{ \frac{(\ell+1)(\ell+2)(\ell+3)}{(2\ell+1)(2\ell+3)(2\ell+5)} \left| T_{\ell+1,\ell+2,\ell+3}(\omega) \right|^2 \right.$$
$$+ \frac{\ell(\ell+1)(\ell+2)(2\ell-1)(2\ell+5)}{15(2\ell+1)} \left| \frac{T_{\ell+1,\ell+2,\ell+1}(\omega)}{(2\ell+3)(2\ell+5)} + \frac{T_{\ell+1,\ell,\ell+1}(\omega)}{(2\ell+1)(2\ell+3)} + \frac{T_{\ell-1,\ell,\ell+1}(\omega)}{(2\ell-1)(2\ell+1)} \right|^2$$
$$+ \frac{\ell(\ell-1)(\ell+1)(2\ell-3)(2\ell+3)}{15(2\ell+1)} \left| \frac{T_{\ell-1,\ell,\ell-1}(\omega)}{(2\ell-1)(2\ell+1)} + \frac{T_{\ell-1,\ell-2,\ell-1}(\omega)}{(2\ell-3)(2\ell-1)} + \frac{T_{\ell+1,\ell,\ell-1}(\omega)}{(2\ell+1)(2\ell+3)} \right|^2$$

(IV-4.9)

$$\left. + \frac{\ell(\ell-1)(\ell-2)}{(2\ell-3)(2\ell-1)(2\ell+1)} \left| T_{\ell-1,\ell-2,\ell-3}(\omega) \right|^2 \right\}$$

## IV-5 EFFET DE POLARISATION

Ainsi que nous l'avons signalé ci-dessus, l'observation en 1971 de l'effet de polarisation éveilla immédiatement l'intérêt des théoriciens. Dès 1972, P. LAMBROPOULOS (137) en proposa une interprétation et montra, en se basant sur la forme de la distribution angulaire des photoélectrons émis, que la valeur maximum accessible du rapport $\sigma'/\sigma$ pour un état S était respectivement

$$\max. \left(\frac{\sigma'}{\sigma}\right)_2 = 1{,}5 \text{ ; pour 2 photons} \qquad \text{(IV-5.1)}$$

et max. $\left(\frac{\sigma'}{\sigma}\right)_3$ = 2,5 ; pour 3 photons (IV-5.2)

Nous montrerons plus loin comment nous avons pu généraliser ces résultats au cas de l'ionisation par N photons (138). Mais auparavant, nous allons constater qu'il est possible de retrouver le résultat pour 3 photons à partir des expressions respectives de $\sigma_{n,\ell}$ eq. (IV-3.12) et $\sigma'_{n,\ell}$ Eq. (IV-4.9), sans qu'il soit nécessaire de calculer explicitement les amplitudes radiales T.

Détaillons d'abord le cas le plus simple d'un état initial S. Comme nous l'avons signalé ci-dessus une seule voie est alors ouverte si le rayonnement incident est polarisé circulairement : il s'agit de la voie "montante" $\ell = 0 \to 1 \to 2 \to 3$. Par contre, pour la polarisation linéaire, deux états finals distincts sont accessibles : L = 3 et L = 1. Les voies respectives pour les atteindre sont alors :

$$\left.\begin{aligned} \ell &= 0 \to 1 \to 2 \to 3 \\ \ell &= 0 \to 1 \to 2 \to 1 \\ \ell &= 0 \to 1 \to 0 \to 1 \end{aligned}\right\}$$

Cette situation est schématisée dans le graphique ci-contre.

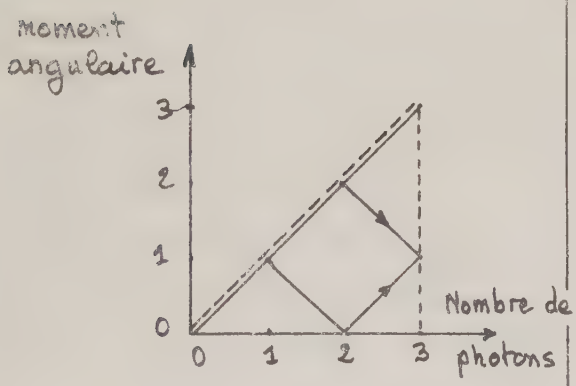



Fig. 4.4
Voies permises lors de l'ionisation par trois photons d'un état S

------ polarisation circulaire

_____ polarisation linéaire

Les expressions correspondantes des sections efficaces obtenues à partir des formules (IV-3.12) et (IV-4.9) sont respectivement :

$$\sigma_{n,0} = C^{te.} \left[ \frac{4}{175} \left| T_{1,2,3}(\omega) \right|^2 + \frac{1}{27} \left| T_{1,0,1}(\omega) + \frac{4}{5} T_{1,2,1} \right|^2 \right] \quad \text{(IV-5.3)}$$

$$\sigma'_{n,0} = C^{te.} \frac{2}{35} \left| T_{1,2,3}(\omega) \right|^2 \text{ ; où } C^{te.} = 4\pi^2 \alpha a_0^2 \omega \left( \frac{I}{2I_0} \right)^2 \quad \text{(IV-5.4)}$$

On constate alors que la valeur maximum du rapport $\sigma'/\sigma$ est atteinte, lorsqu'au dénominateur la contribution (toujours positive) des voies menant à l'état final L = 1 devient nulle ou au moins voisine de zéro (*). On vérifie alors que :

(*) Nous montrerons plus loin que cette condition, qui peut paraitre très restrictive, est en fait remplie dans un assez grand intervalle d'énergie.

(138) : $\max \left(\frac{\sigma'}{\sigma}\right)_3 = \frac{5}{2}$

Notons qu'une analyse similaire appliquée à l'ionisation par deux photons donne :

$$\max \left(\frac{\sigma'}{\sigma}\right)_2 = \frac{3}{2}$$

Ces résultats étant démontrés pour un état initial S, il nous a paru intéressant de l'étendre au cas d'un état initial quelconque. En ce qui concerne le nombre de voies ouvertes, il apparaît que la polarisation circulaire est moins défavorisée, pour un état initial $\ell \neq 0$, que pour un état $\ell = 0$. La situation pour un état P, par exemple, est schématisée sur le graphique ci-contre.

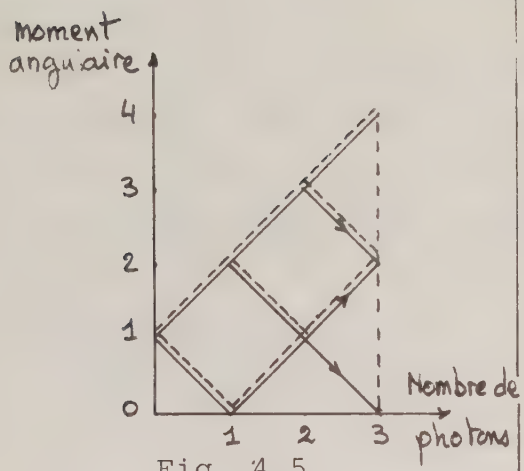



Fig. 4.5

Voies permises lors de l'ionisation par 3 photons d'un état P.
---- polarisation circulaire
____ polarisation linéaire

On pouvait donc imaginer a priori, que la valeur maximum du rapport $\sigma'_{n\ell} / \sigma_{n\ell}$ serait modifiée. En fait, nous avons pu montrer que quel que soit l'état $(n, \ell)$ considéré, le maximum obtenu pour un état S ne peut être dépassé.

Pour le vérifier évaluons la différence :

$$\frac{5}{2}\sigma_{n,\ell} - \sigma'_{n,\ell} = C^{te.}\,\frac{1}{30(2\ell+1)}\left\{(\ell+1)\,|Q_{\ell+1}|^2 + \ell\,|Q_{\ell-1}|^2\right\} \quad \text{(IV-5.5)}$$

où les quantités $Q_{\ell+1}$ et $Q_{\ell-1}$ ont pour formes respectives :

$$Q_{\ell+1} = \frac{2(\ell+2)}{(2\ell+3)}\,T_{\ell+1,\ell+2,\ell+1}(\omega) + \frac{4\ell^2+8\ell+5}{(2\ell+1)(2\ell+3)}\,T_{\ell+1,\ell,\ell+1}(\omega) + \frac{2\ell}{2\ell+1}\,T_{\ell-1,\ell,\ell+1}(\omega) \quad \text{(IV-5.6)}$$

$$Q_{\ell-1} = \frac{2(\ell+1)}{(2\ell+1)}\,T_{\ell+1,\ell,\ell-1}(\omega) + \frac{4\ell^2+1}{(2\ell-1)(2\ell+1)}\,T_{\ell-1,\ell,\ell-1}(\omega) + \frac{2(\ell-1)}{(2\ell-1)}\,T_{\ell-1,\ell-2,\ell-1}(\omega)$$

La différence $\frac{5}{2}\sigma_{n,\ell} - \sigma'_{n,\ell}$ est donc toujours $> 0$ et la valeur maximum du rapport $\sigma'/\sigma$ est $= 5/2$ comme pour les états S.

Il est intéressant de rappeler que ce résultat donnant $\max. \left(\frac{\sigma'}{\sigma}\right)_3$ a été obtenu grâce à un raisonnement reposant

uniquement sur des considérations liées au couplage des moments angulaires. Ce même résultat ne dépend pas des valeurs exactes des éléments de matrices radiaux T. Mais bien entendu, pour connaître les valeurs précises de $\sigma_{n,\ell}$ et $\sigma'_{n,\ell}$, il est nécessaire de calculer ces parties radiales, ce qui représente la principale difficulté du problème. Nous en exposons le calcul dans le paragraphe suivant.

## IV-6 IONISATION PAR TROIS PHOTONS - PARTIE RADIALE

Le calcul de l'amplitude réduite $T_{\lambda_1\lambda_2 L}(\omega)$ est effectué en introduisant la partie radiale de la fonction de Green coulombienne :

$$G_\lambda(W) = \sum_\nu \frac{|R_{\nu\lambda}\rangle\langle R_{\nu\lambda}|}{W - E_\nu} \qquad \text{(IV-6.1)}$$

$T_{\lambda_1\lambda_2 L}(\omega)$ s'écrit alors :

$$T_{\lambda_1\lambda_2 L}(\omega) = \langle R_{\ell_2,L}|r|G_{\lambda_2}(E_n+2\omega)|r|G_{\lambda_1}(E_n+\omega)|r|R_{n,\ell}\rangle \qquad \text{(IV-6.2)}$$

Les représentations de la fonction de Green, que nous avons utilisées précédemment pour les processus du second ordre, se sont révélées inadéquates dans ce calcul du troisième ordre. En effet, nous n'avons pu surmonter la difficulté liée à la présence d'intégrales multiples qui complique significativement le calcul analytique. Pour résoudre ce problème, nous avons donc utilisé la représentation sturmienne (I-5.14) de la fonction de Green. Nous pouvons signaler tout de suite que l'introduction de cette représentation s'est révélée très féconde puisqu'elle nous a permis d'étendre nos résultats aux ordres supérieurs. Pour expliciter l'expression (IV-6.2) de l'amplitude réduite T nous introduisons donc :

$$G_\lambda(r_2,r_3;W) = -\frac{2^{2\lambda+2}\,x^{2\lambda+1}}{[(2\lambda+1)!]^2}\, e^{-x(r_1+r_2)}\,(r_1r_2)^\lambda \sum_{m=\lambda+1}^{\infty}\left(m-\frac{1}{x}\right)^{-1}\frac{(m+\lambda)!}{(m-\lambda-1)!}$$

$$ {}_1F_1(\lambda+1-m;2\lambda+2;2xr_1)\;{}_1F_1(\lambda+1-m;2\lambda+2;2xr_2) \qquad \text{(IV-6.3)}$$

où $x = \sqrt{-2W}$ ; $W < 0$ ;

la fonction d'onde radiale de l'état lié initial :

$$R_{n,\ell}(r) = C_{n,\ell}\, e^{-r/n}\, r^{\ell}\, {}_1F_1\left(-n+\ell+1 ; 2\ell+2 ; \frac{2r}{n}\right) \qquad \text{(IV-6.4)}$$

où la constante $C_{n,\ell} = \dfrac{2^{\ell+1}}{(2\ell+1)!}\, \dfrac{1}{n^{\ell+2}} \left[\dfrac{(n+\ell)!}{(n-\ell-1)!}\right]^{1/2}$ ; (IV-6.5)

et pour la fonction d'onde radiale de l'état final appartenant au continuum :

$$R_{k,L} = C_{k,L}\, e^{-ir/k}\, r^{L}\, {}_1F_1\left(\frac{i}{k}+L+1 ; 2L+2 ; 2ikr\right) \qquad \text{(IV-6.6)}$$

avec :

$$C_{k,L} = \frac{2^{L+1}}{(2L+1)!}\, k^{L} \left[\frac{\prod_{s=1}^{L}\left(s^2 + k^{-2}\right)}{1-\exp(-2\pi/k)}\right]^{1/2} ; \quad \frac{k^2}{2} = 3\omega - \frac{1}{2n^2} \qquad \text{(IV-6.7)}$$

L'amplitude réduite $T_{\lambda_1\lambda_2 L}(\omega)$ devient donc :

$$T_{\lambda_1\lambda_2 L}(\omega) = C_{n,\ell}\, C_{k,L}\, \frac{2^{4+2\lambda_1+2\lambda_2}\; x_1^{2\lambda_1+1}\; x_2^{2\lambda_2+1}}{\left[(2\lambda_1+1)!\;(2\lambda_2+1)!\right]^2} \sum_{m_1=\lambda_1+1}^{\infty} \left(m_1 - \frac{1}{x_1}\right)^{-1} \frac{(m_1+\lambda_1)!}{(m_1-\lambda_1-1)!}$$

$$J\left(n,\ell,\tfrac{1}{n} \,|\, m_1\lambda_1 x_1\right) \sum_{m_2=\lambda_2+1}^{\infty} \left(m_2 - \frac{1}{x_2}\right)^{-1} \frac{(m_2+\lambda_2)!}{(m_2-\lambda_2-1)!}\, J\left(m_1\lambda_1 x_1 \,|\, m_2\lambda_2 x_2\right) J\left(m_2\lambda_2 x_2 \,|\, -\tfrac{i}{k}, L, ik\right) \qquad \text{(IV-6.8)}$$

où : $x_1 = (n^{-2} - 2\omega)^{1/2}$ ; $x_2 = (n^{-2} - 4\omega)^{1/2}$

et les fonctions $J(m\lambda x \,|\, m'\lambda' x')$ représentent les intégrales (x)

$$J(m\lambda x \,|\, m'\lambda' x') = \int_0^{\infty} dr\, r^{3+\lambda+\lambda'}\, e^{-r(x+x')}\, {}_1F_1(\lambda+1-m ; 2\lambda+2 ; 2xr)\, {}_1F_1(\lambda'+1-m' ; 2\lambda'+2 ; 2x'r) \qquad \text{(IV-6.9)}$$

correspondant aux transitions d'un état $(m, \lambda)$ vers l'état $(m', \lambda')$. Le couplage des moments angulaires imposant la règle de sélection $\lambda' = \lambda \pm 1$, on se trouve ramené à un type d'intégrale proche de celui étudié par W. GORDON (91). Le principe du calcul consiste à exprimer $J(m\lambda x \,|\, m'\lambda' x')$ en fonction d'une intégrale connue :

$$\int_0^{\infty} dr\, r^{c-1}\, e^{-r(x+x')}\, {}_1F_1(a ; c ; 2xr)\, {}_1F_1(a' ; c ; 2x'r) \qquad \text{(IV-6.10)}$$

$$= \Gamma(c)\,(x+x')^{a+a'-c}\,(x-x')^{-a}\,(x'-x)^{-a'}\, {}_2F_1\left(a, a' ; c ; \frac{-4xx'}{(x-x')^2}\right)$$

(Re $c > 0$) ; ${}_2F_1$ est une fonction hypergéométrique de Gauss. Pour obtenir $J(m\lambda x \,|\, m'\lambda' x')$ en fonction de cette dernière intégrale, il suffit d'utiliser des relations de contiguité connues vérifiées par les fonctions ${}_1F_1$ (cf. réf. 89 , § 9.212)

---

(x) Cette définition reste vraie si les paramètres $m, x$ ou $m', x'$ ont des valeurs complexes.

que l'on insère dans (IV-6.9). Tous calculs faits, on obtient l'intégrale cherchée sous la forme d'une combinaison linéaire d'intégrales du type (IV-6.10) :

$$J(m,\lambda,x|m',\lambda',x') = (-1)^{\lambda_<} \frac{(2\lambda_>+1)!}{2x_>^2 (x_<-x_>)^{2\lambda_>+2}} \left(\frac{x_>-x_<}{x_>+x_<}\right)^{m_>} \left(\frac{x_<-x_>}{x_>+x_<}\right)^{m_<} \sum_{q=0}^{2} \binom{2}{q} \quad \text{(IV-6.11)}$$

$$\left[x_>(m_>-1+q)-x_< m_<\right] \left(\frac{x_> x_<}{x_>+x_<}\right)^q {}_2F_1\left(\lambda_>+1-m_>-q, \lambda_<+1-m_<; 2\lambda_>; \frac{-4x_>x_<}{(x_>-x_<)^2}\right)$$

où $\lambda_>$ = sup. $(\lambda,\lambda')$ ; $\lambda_<$ = inf. $(\lambda,\lambda')$ et $m_>, x_>$ $(m_<, x_<)$ sont les valeurs respectives des paramètres m, $x$ correspondant à $\lambda_>$ $(\lambda_<)$

Il est intéressant de remarquer la similitude qui existe entre cette formule et celle de W. GORDON (III-5.5) correspondant à une transition entre deux états propres réels de l'atome d'hydrogène. On retrouve en effet la formule de Gordon (III-5.5) en effectuant dans l'expression (IV-6.9) ci-dessus, les transformations respectives $x \to \frac{1}{n}$ ; $x' \to \frac{1}{n'}$ et $m \to n$ ; $m' \to n'$ où n et n' sont des nombres quantiques principaux associés aux valeurs propres de l'énergie. En ce sens, on peut dire que l'expression de l'intégrale $J(m\lambda x|m'\lambda' x')$ représente une généralisation de la formule de Gordon étendue au cas d'une transition entre deux états "sturmiens", non physiques, de l'atome. Plus concrètement, rappelons que le paramètre $x = \sqrt{-2W}$ où $W = -\frac{1}{2n^2} + j\omega$ (j = 1, 2) est considéré ici comme une donnée du problème et m est un nombre quantique entier positif associé aux valeurs propres de la constante de couplage du potentiel.

La formule de Gordon généralisée (IV-6.11) reste valable si les paramètres x et m sont complexes. Cependant, comme nous l'avons constaté à l'occasion du calcul du Logarithme de Bethe (cf. le §III-5B), les calculs numériques deviennent alors plus longs et surtout moins précis. Nous avons évité cette difficulté en utilisant cette fois encore les polynômes de Karzas et Latter (III-5.11). En adaptant et généralisant la méthode décrite dans le paragraphe (III-5.B) on obtient les résultats suivants :

$$J\left(m_2,\lambda_2,x_2\middle|-\tfrac{1}{k},L,ik\right) = \frac{(2\lambda_2+1)!\ \exp\left[\frac{1}{k}(2\operatorname{Arctg} e-\pi)\right]}{2x_2^2\, k^{2\lambda_2+2}\,(1+e^2)^{m_2+2}} \sum_{q=0}^{2} (-1)^q \binom{2}{q} (1+e^2)^q$$

$$\left[x_2(m_2+1-q)-1\right] G_{\lambda_2}\left(\lambda_2+q-1-m_2; \tfrac{1}{k}; e\right) \quad \text{(IV-6.12)}$$

si $L = \lambda_2 - 1$

et si $L = \lambda_2 + 1$ on a :

$$J(m_2\lambda_2 x_2 | -\tfrac{1}{h}, L, ih) = -2\,\frac{(2\lambda_2+1)!}{h^{2\lambda_2+6}}\,\frac{\exp[h^{-1}(2\mathrm{Arctg}\,\epsilon - \pi)]}{(1+\epsilon^2)^{m_2+2}} \sum_{q=0}^{2} \binom{2}{q} (1+\epsilon^2)^{q}\,\alpha\beta \qquad \text{(IV-6.13)}$$

$$\times\,[1 - x_2(m_2+1-q)]\; G_{\lambda_2+2}\left(\lambda_2+1+q-m_2 ; \tfrac{1}{h} ; \epsilon\right).$$

Dans ces expressions on a posé :

$$\epsilon = x_2/h \quad ; \quad \alpha = \lambda_2+1-m_2(q^2-q-1) \quad ; \qquad \text{(IV-6.14)}$$

$$\beta = \lambda_2+2+(m_2+1)q^2-(3m_2+2)q+m_2 \quad ;$$

les polynômes $G_\lambda(-p ; \frac{1}{h} ; \epsilon)$ ont été définis précédemment dans le paragraphe (III-5.B).

Nous voudrions faire ressortir que les fonctions $J(m\lambda x|m\lambda x)$ qu'elles soient d'argument réel (IV-6.11) ou complexe (IV-6.12) et (IV-6.13) sont toujours calculables exactement puisqu'elles se ramènent à des polynômes en x (ou $\epsilon$). Moyennant certaines précautions lorsqu'ils sont d'ordre élevé, ces polynômes peuvent être évalués avec une très grande précision.

D'après l'expression (IV-6.8), l'amplitude réduite $T_{\lambda_1\lambda_2 L}(\omega)$ apparaît sous la forme d'une série double infinie dont chaque terme s'exprime en fonction des polynômes J. Nous avons pu vérifier que cette série converge toujours "raisonnablement" (*) et qu'il est possible, au moins en principe, de calculer sa somme $S_n$ avec toute la précision voulue. Par exemple, nous avons choisi de "couper" la série lorsque le rapport du nième terme $U_n$ à la somme $S_n$ est tel que $|U_n/S_n| < \varepsilon$, $\varepsilon$ étant un paramètre positif arbitrairement petit. On peut s'assurer de la validité de cette approximation en vérifiant que la somme ne dépend pas de la valeur de $\varepsilon$ si celle-ci varie tout en restant suffisamment petite. Précisons, pour fixer les idées, que nos calculs ont été effectués le plus souvent avec $\varepsilon = 10^{-4}$ en vérifiant régulièrement que les valeurs obtenues pour la somme ne changeaient pas notablement si l'on choisissait $\varepsilon = 10^{-6}$ ou $\varepsilon = 10^{-8}$.

Nous exposons les résultats, que nous avons obtenus par cette méthode, dans le paragraphe suivant.

---

(*) Nous entendons par là que, au-delà d'une certaine valeur de l'indice, le terme général tend vers zéro en valeur absolue et que la série converge alors rapidement.

## IV- 7 RESULTATS

Rappelons que nous avions deux buts en poursuivant ce travail : d'une part obtenir une vérification indépendante des résultats antérieurs de Y. GONTIER et M. TRAHIN (publiés en 1971 (118) puis en 1973 (122)) et d'autre part étudier de manière plus approfondie l'effet de polarisation mentionné ci-dessus.

La première partie de ce programme a été réalisée en étudiant les variations de la section efficace totale d'ionisation par trois photons des états 1 S et 2 S. Pour cela, nous avons représenté graphiquement les variations des sections efficaces (rapportées au carré de l'intensité du rayonnement incident et donc exprimées en $cm^6$ $watt^{-2}$ ; cf. l'annexe B) en fonction de la longueur d'onde, exprimée en $\mathring{A}$, de la radiation incidente.

L'intervalle de longueur d'onde étudié dépend bien entendu de l'état considéré. En effet, l'ionisation d'un niveau $n$ par trois photons n'est possible que si l'énergie $\omega$ de chaque photon vérifie l'inégalité :

$$3\omega \geq \frac{1}{2n^2} \qquad \text{(en unités atomiques)}$$

Pour une énergie inférieure : $3\omega < \frac{1}{2n^2}$ le processus d'ionisation nécessiterait au moins quatre photons. Si $3\omega = \frac{1}{2n^2}$ on est au seuil d'ionisation par trois photons et le photoélectron est éjecté avec une énergie nulle.

Lorsque l'énergie des photons est telle que $2\omega \geq \frac{1}{2n^2}$, on atteint puis dépasse le seuil d'ionisation par 2 photons. Ce dernier processus devient alors largement dominant et bien que l'ionisation par trois photons reste possible, elle n'apporte qu'une faible contribution à la section efficace totale. Ceci s'explique pour l'essentiel, par l'introduction du facteur multiplicatif $(I/2\ I_o) \sim I\ (watt/cm^2) \times 10^{-17}$ apparaissant lorsqu'on passe d'un effet d'ordre donné à celui d'ordre immédiatement supérieur. Notons également que si l'on se place dans ce domaine d'énergie,

la variable $x_2 = (n^{-2} - 4\omega)^{1/2}$ devient imaginaire ; il est alors nécessaire d'effectuer un prolongement analytique sur l'expression de l'amplitude réduite T. Nous renvoyons le lecteur intéressé par ce problème à l'analyse qui en a été faite par W. ZERNIK et R.W. KLOPFENSTEIN (21) et S. WANE (142) dans le cas de l'ionisation par deux photons. Pour notre part, à l'instar de Y. GONTIER et M. TRAHIN, nous nous sommes limité à l'étude de l'intervalle d'énergie compris entre les deux "seuils" c'est-à-dire tel que :

$$1/4\ n^2 > \omega \geqslant 1/6\ n^2$$

soit, pour les longueurs d'ondes exprimées en Ångström :

$$\lambda = \frac{911.76}{2\omega} \Rightarrow 2n^2 \times 911{,}76 < \lambda \leqslant 3n^2 \times 911{,}76 .$$

La comparaison avec les résultats antérieurs obtenus par Gontier et Trahin pour les états 1S et 2S est très favorable puisque nos courbes coïncident pratiquement, exactement avec les leurs.

Quant à la deuxième partie de notre programme, concernant plus particulièrement l'effet de polarisation, nous avons représenté graphiquement les variations des sections efficaces $\sigma$ et $\sigma'$ obtenues en lumière polarisée linéairement et circulairement. Enfin, pour rendre compte plus clairement de cet effet de polarisation, nous avons tracé également les variations du rapport $\sigma'/\sigma$ en fonction de $\lambda$. Les différentes courbes obtenues sont données ci-après pour chacun des états 1 S à 3 D.

L'examen d'ensemble de ces figures révèle plusieurs faits intéressants que nous passons en revue succinctement ci-après.

a) - Structure résonante

Ces courbes présentent toutes une structure résonante correspondant à l'effet des transitions réelles entre l'état initial et un état plus excité, consécutives à l'absorption d'un ou deux photons. Les résonances apparaissent donc à des longueurs d'ondes qui sont toujours des multiples entiers de celles de la série de Lyman pour l'état fondamental, de la série de Balmer pour les états n = 2, etc... Pour ces longueurs d'ondes, la section efficace devient infinie, ce qui correspond à l'annulation

LEGENDE DES FIGURES

(4.6 à 4.11)

---

Variation des sections efficaces d'ionisation par trois photons de l'atome d'hydrogène en fonction de la longueur d'onde du rayonnement incident.

---------- polarisation linéaire $\sigma$

_____ polarisation circulaire $\sigma'$

Les sections efficaces $\frac{\sigma}{I^2}$ sont exprimées en $cm^6$ $watt^{-2}$.

Sur chaque graphique nous avons fait figurer également les variations du rapport $\sigma'/\sigma$ en fonction de la longueur d'onde.

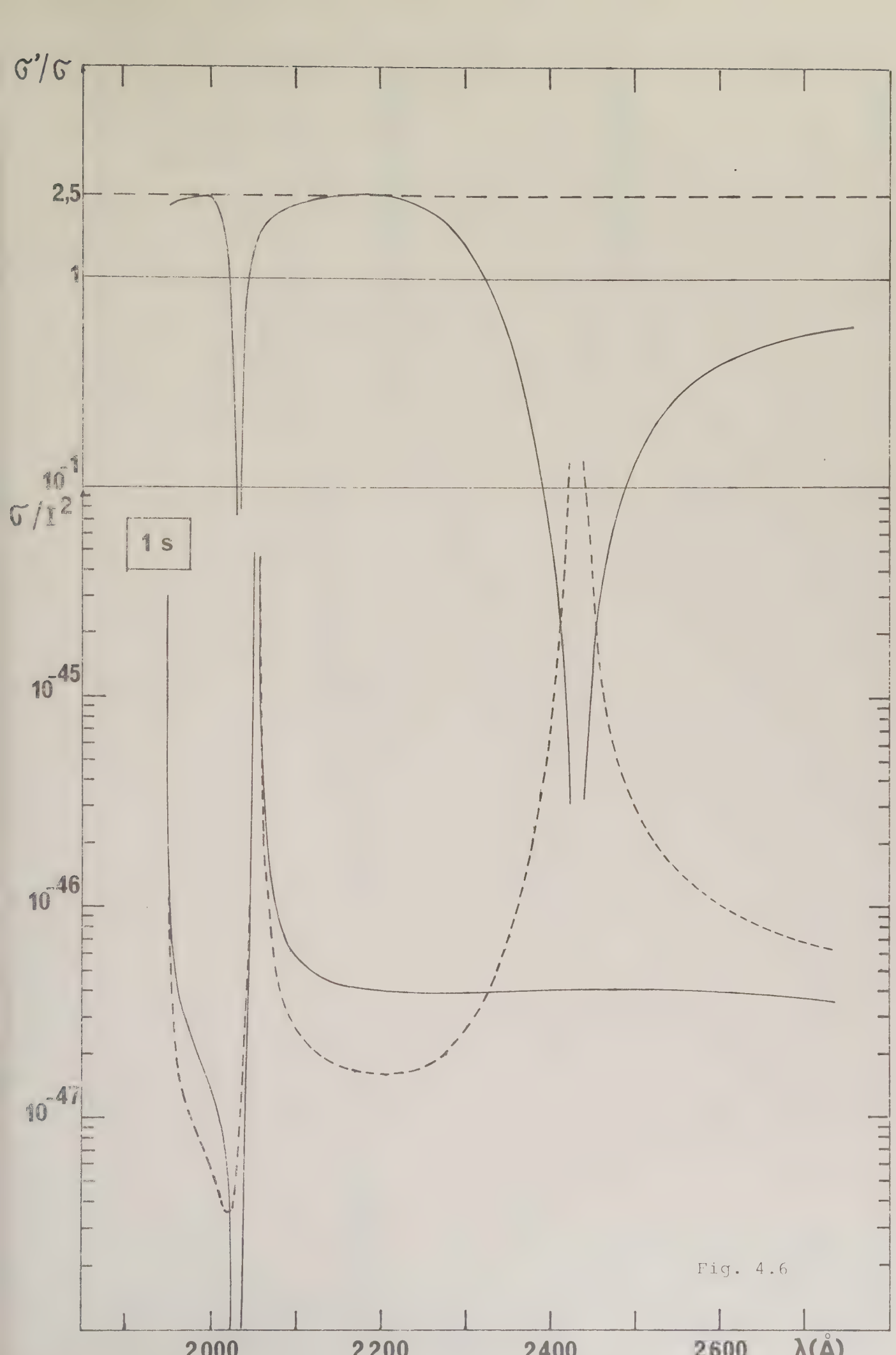



Fig. 4.6

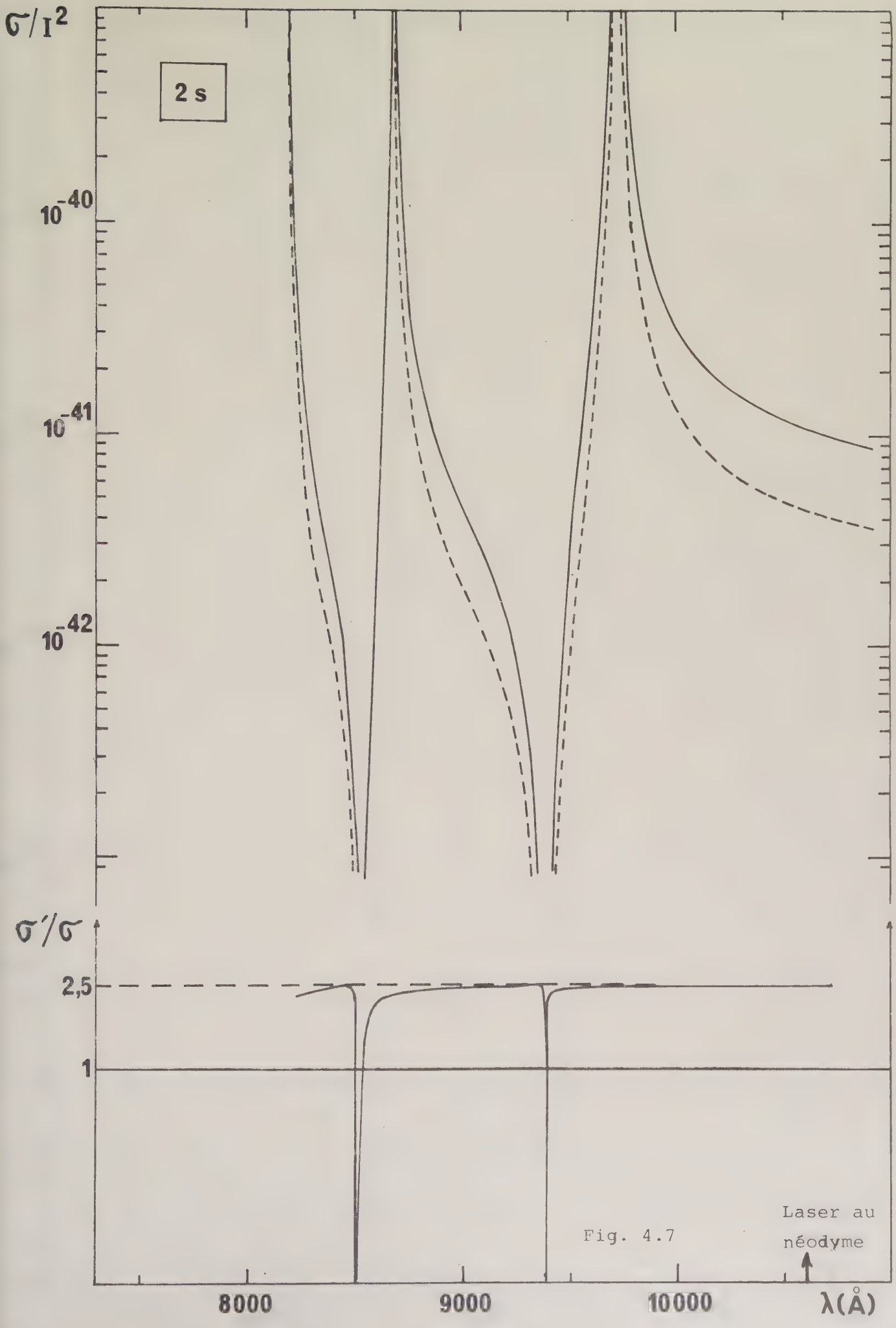

σ/I²
2 s
10⁻⁴⁰
10⁻⁴¹
10⁻⁴²
σ'/σ
2,5
1
8000
9000
10000
λ(Å)
Laser au
néodyme

Fig. 4.7

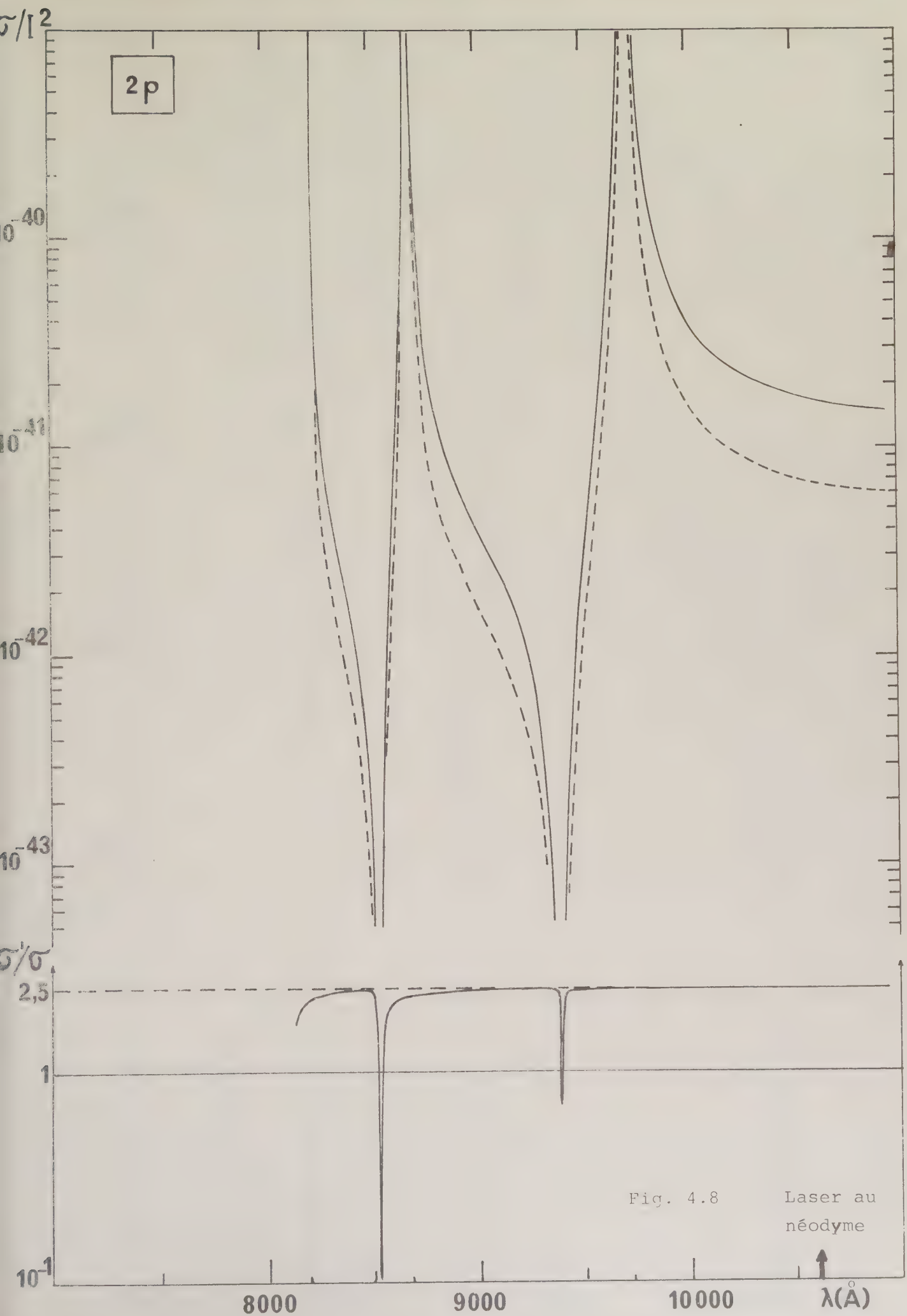



Fig. 4.8 Laser au néodyme

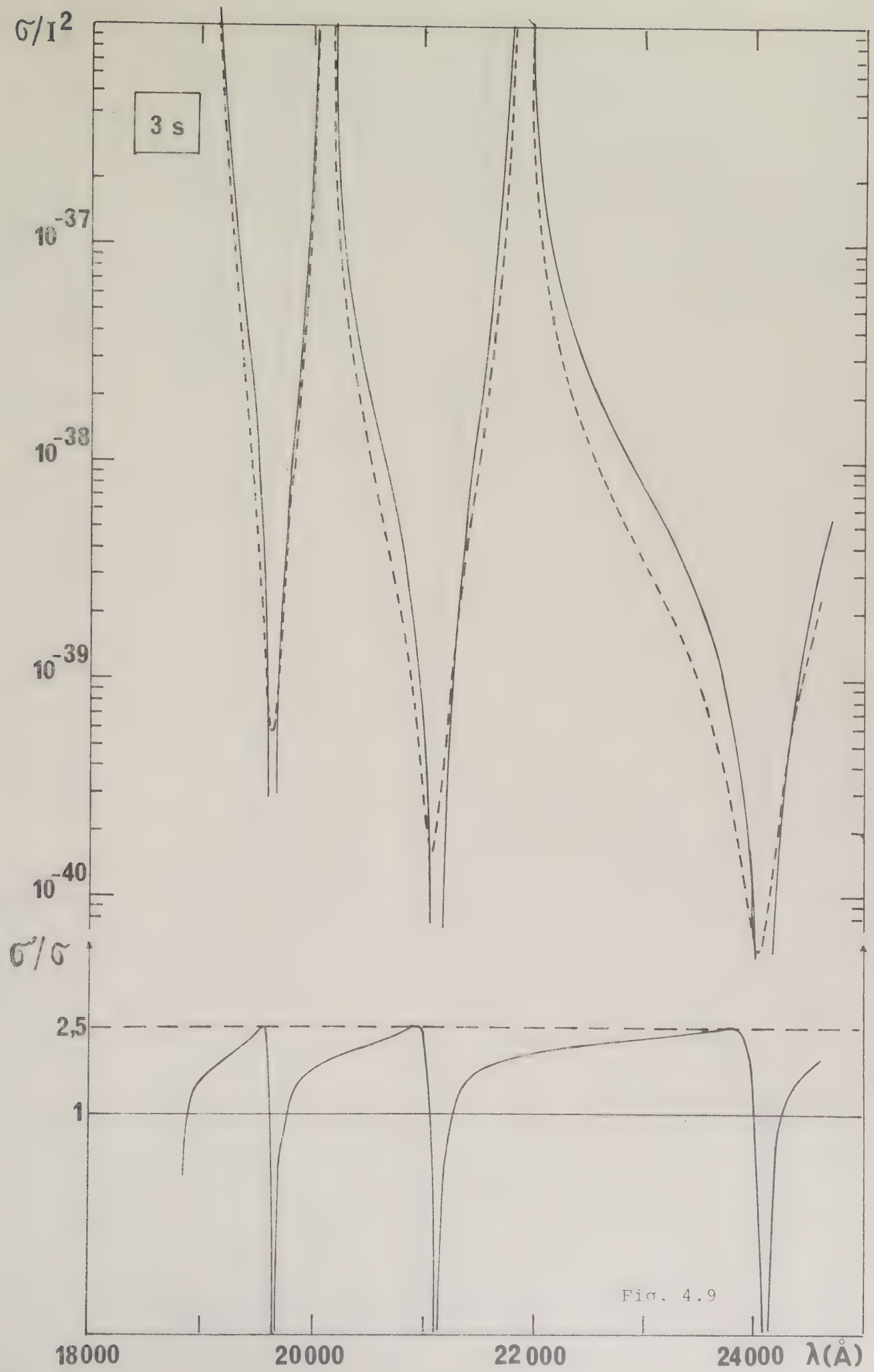



Fig. 4.9

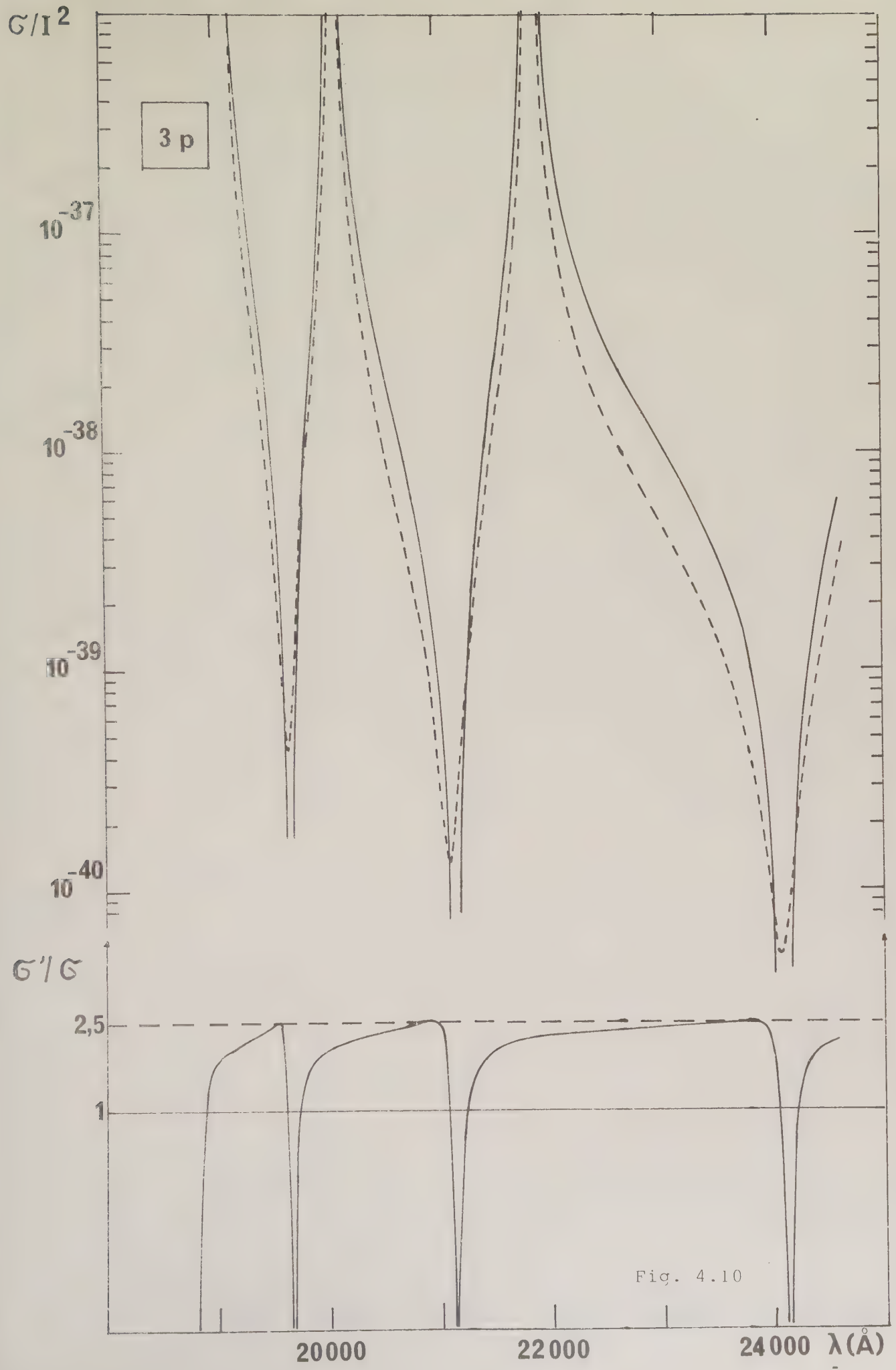



Fig. 4.10

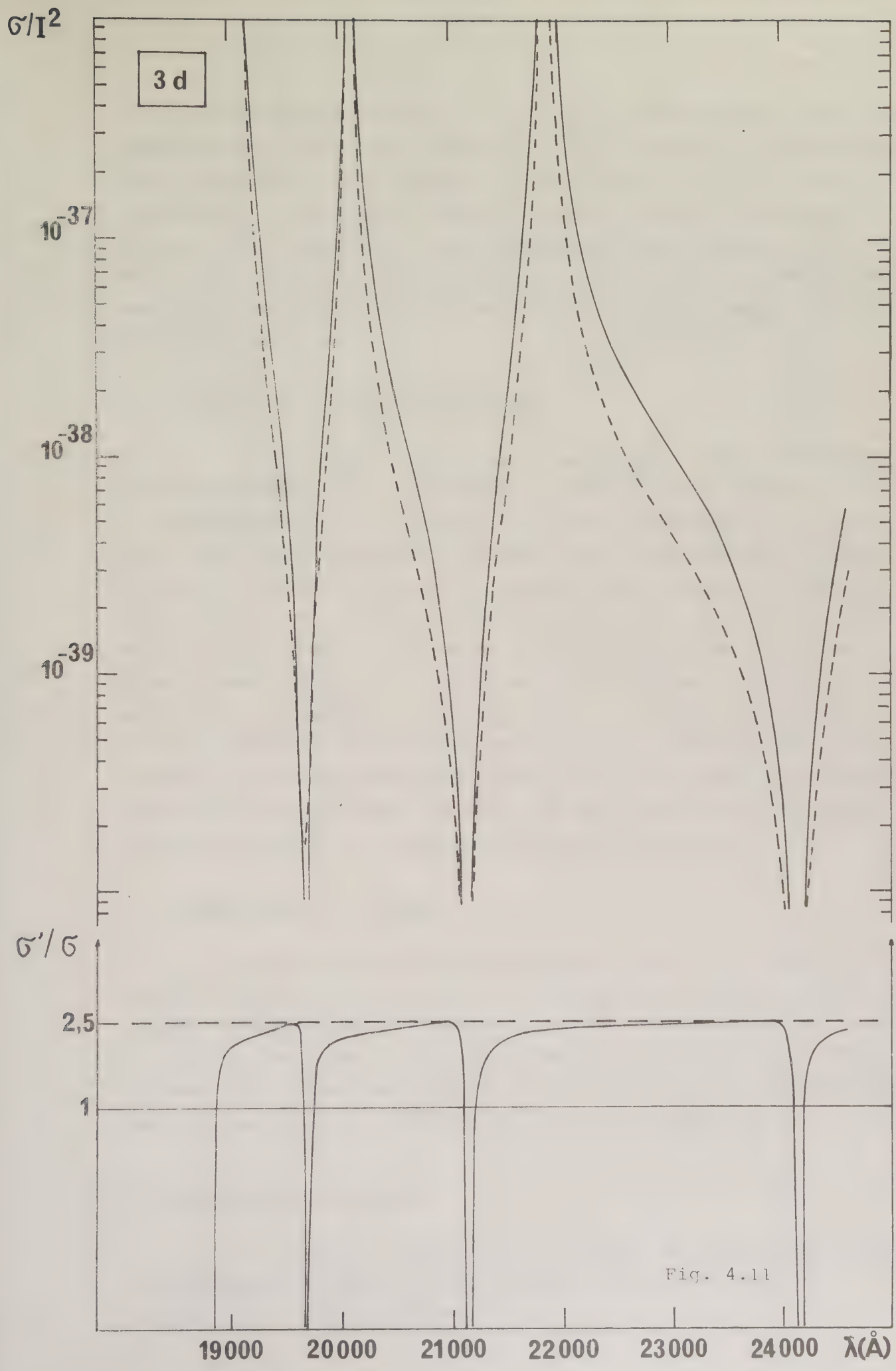

σ/I²
3 d
10⁻³⁷
10⁻³⁸
10⁻³⁹
σ'/σ
2,5
1
19000
20000
21000
22000
23000
24000
λ(Å)

Fig. 4.11

de l'un des dénominateurs , $(x - \frac{1}{m})$ apparaissant dans l'expression de l'amplitude réduite T. Bien entendu, ce comportement "non physique" a pour origine le fait que nous n'avons pas attribué de largeurs aux niveaux de notre modèle atomique. Notons enfin que nous n'avons pas exploré la zone proche du seuil "à 2 photons" car l'accumulation observée des résonances rend sans signification les résultats obtenus, compte tenu du modèle choisi.

b) - Minima entre deux résonances

On constate d'autre part que, entre deux résonances, les courbes passent par un minimum, le plus souvent profond. Ce comportement de la section efficace s'explique par le fait que, entre deux résonances, chaque amplitude réduite T change de signe et passe donc par la valeur zéro. Ainsi, on constate que, dans le cas de l'ionisation des états S en lumière polarisée circulairement, la section efficace s'annule lorsqu'on passe d'une résonance à la suivante car un seul élément de matrice T, correspondant à l'unique voie ouverte, est alors concerné. Dans le cas général où plusieurs chemins sont accessibles, la section efficace passe par un minimum plus ou moins prononcé mais différent de zéro, ce qui montre que les amplitudes réduites T ne s'annulent pas simultanément.

c) Comportement au seuil

Les courbes montrent également que les sections efficaces restent finies au seuil d'ionisation (l'énergie cinétique du photoélectron tend alors vers zéro). Cette propriété caractérise les sections efficaces relatives à l'effet photoélectrique (141). Nous montrerons ci-après comment se transforment les expressions des sections efficaces au seuil.

d) Effet de polarisation

Ces courbes permettent également de mettre en évidence l'influence de l'état de polarisation du rayonnement sur la valeur de la section efficace.

Tout d'abord, un examen rapide de l'ensemble des courbes montre qu'en général, la polarisation circulaire est avantagée, hormis en quelques domaines très étroits correspondant aux minima profonds des sections efficaces. Pour les états S, le rapport tend alors vers zéro puisque, nous l'avons vu ci-dessus, $\sigma'$ s'annule alors que $\sigma$ reste finie. Pour les autres états, bien que le rapport s'approche de zéro, il reste non-nul. En dehors de ces zones relativement étroites, on peut constater que le rapport $\sigma'/\sigma$ reste supérieur à 1 et assez souvent proche du maximum théorique 5/2. Ce résultat, surprenant à priori, indique que la contribution des "voies montantes" $\ell \to \ell + 1 \to \ell + 2 \to \ell + 3$ reste prépondérante, ce qui entraine que $\sigma'/\sigma$ reste voisin du rapport des parties angulaires correspondantes (voir ci-dessus § IV-5).

On observe d'autre part que, pour une longueur d'onde donnée, le rapport $\sigma'/\sigma$ croit légèrement lorsqu'on passe d'un état S à un état P, puis D pour un nombre quantique principal n donné. Ceci bien entendu, correspond à l'augmentation relative du nombre de voies ouvertes en polarisation circulaire. Pourtant, il est intéressant de constater que l'accroissement du rapport reste faible, ce qui confirme que, au moins pour l'ionisation à trois photons, la contribution de la "voie montante" reste dominante.

Les considérations précédentes, relatives à la prépondérance de la polarisation circulaire, souffrent cependant une exception notable pour l'état fondamental 1 S. En effet, la courbe (4-1) montre que pour cet état, une résonance à 2431 Å n'est observée qu'en lumière polarisée linéairement. Elle correspond à la transition réelle à deux photons entre l'état fondamental et l'état 2 S. Or cet état n'est pas accessible si le rayonnement est polarisé circulairement puisqu'une seule voie est ouverte dans ce cas : après l'absorption de deux photons, le système atomique ne peut atteindre qu'un état d. Cette circonstance entraine que le rapport $\sigma'/\sigma$ s'annule puis reste très inférieur à l'unité, dans un large intervalle de fréquences de part et d'autre de cette résonance.

Nous retrouverons ce phénomène à l'occasion de l'étude des processus mettant en jeu plus de 3 photons; mais d'ores et déjà, il apparait que les résultats obtenus pour les états les

plus profonds ne peuvent être étendus sans précautions aux états les plus excités.

Enfin, on observe que la valeur au seuil du rapport $\sigma'/\sigma$ dépend fortement de la présence (ou de l'absence) de résonances accessibles en lumière polarisée circulairement. En conséquence, l'étude du comportement des sections efficaces au seuil fournit une indication intéressante sur l'évolution générale de ce rapport. Nous traitons de ce point particulier dans le paragraphe suivant.

## IV-8. SECTION EFFICACE AU SEUIL D'IONISATION PAR TROIS PHOTONS

Comme nous l'avons signalé ci-dessus, le comportement de la section efficace au seuil donne une indication au moins qualitative sur l'effet de polarisation pour un état $(n,\ell)$ donné. Cette circonstance a d'ailleurs été utilisée par H.R. REISS (126) pour étudier ce problème dans le cadre de la théorie, dite de translation d'impulsion, dont il est l'auteur. Il nous a donc semblé intéressant d'effectuer le calcul explicite de la forme limite de l'amplitude réduite de transition T, lorsque l'impulsion k du photoélectron tend vers zéro.

L'examen de l'expression de T (IV-6.8) montre que le problème se ramène à celui de l'étude du comportement de la constante de normalisation $C_{k,L}$ Eq. (IV-6.5) et de l'intégrale $J\left(m_2\lambda_2 x_2 \middle| -\frac{i}{k}, L, ik\right)$ lors du passage à la limite $k \to o$.

Tout d'abord on montre aisément que :

$$(\lim.\ k\to o)\ C_{k,L} = \frac{2^{L+1}}{(2L+1)!}$$

Ensuite (lim. $k\to o$) $J\left(m_2\lambda_2 x_2 \middle| -\frac{i}{k}, L, ik\right)$ est obtenue relativement facilement à partir des expressions (IV-6.12) et (IV-6.13), après avoir remplacé les polynômes $G_\lambda$ par leurs expressions, à l'aide des fonctions hypergéométriques de Gauss, Eq. (III-5.11). On constate alors que le passage à la limite $k \to o$ correspond au processus de confluence de ces fonctions, processus déjà décrit au paragraphe (III-5). Nous ne détaillerons donc pas les calculs . On obtient les formes limites suivantes :

$$(\lim k\to 0)\; J(m_2\lambda_2 x_2 | -\tfrac{i}{k}, \lambda_2-1, ik) = (-1)^{m_2-\lambda_2-1}\frac{e^{-2/x_2}(2\lambda_2+1)!}{2\,x_2^{2\lambda_2+4}}\sum_{q=0}^{2}\binom{2}{q}$$

$$[x_2(m_2+1-q)-1]\;{}_1F_1(\lambda_2+q-m_2-1\,;\,2\lambda_2\,;\,4/x_2)$$

pour le cas $L = \lambda_2 - 1$ ; et :

$$(\lim k\to 0)\; J(m_2\lambda_2 x_2 | -\tfrac{i}{k}, \lambda_2+1, ik) = (-1)^{m_2+\lambda_2}\frac{2e^{-2/x_2}(2\lambda_2+1)!}{x_2^{2\lambda_2+6}}\sum_{q=0}^{2}(-1)^q\binom{2}{q}$$

$$[1-x_2(m_2+1-q)]\,\alpha\,\beta\;{}_1F_1(\lambda_2+q+1-m_2\,;\,2\lambda_2\,;\,4/x_2)$$

pour le cas $L = \lambda_2 + 1$.

Dans ces expressions, les paramètres ont la même signification que dans les relations correspondantes (IV-6.12) et (IV-6.13) ; les coefficients $\alpha$ et $\beta$ sont donnés par la formule (IV-6.14). On peut noter que les fonctions hypergéométriques confluentes ${}_1F_1$ sont des polynômes, ce qui permet un calcul exact des formes limites des fonctions J. Enfin, avant de poursuivre, nous voudrions faire remarquer l'analogie formelle qui existe entre ces formules et l'équation (III-5.7) donnant la forme asymptotique $n' \to \infty$ de l'amplitude de transition dipolaire entre deux états liés ($\lim n' \to \infty$) $\mathcal{R}^{n',\ell-1}_{n,\ell}$. Dans ce dernier cas, on approchait du seuil "par-dessous " (cas limite d'une transition entre états liés), alors que cette fois-ci, on l'approche "par-dessus" (cas limite d'une transition vers le continuum).

En remplaçant $C_{k,L}$ et les fonctions J par leurs expressions dans la forme générale de T (Eq. IV-6.8), on obtient aisément la section efficace au seuil, que l'on peut alors calculer avec la précision voulue. Nous avons obtenu ainsi les valeurs suivantes des sections efficaces et de leur rapport pour les états $^1S \to {}^6D$ : voir le tableau (4-2).

L'examen de ce tableau montre que les résultats concernant les états les plus excités, confirment dans l'ensemble l'analyse de l'effet de polarisation que nous avions détaillée dans le paragraphe précédent. Il apparaît clairement que la polarisation circulaire est avantagée le plus souvent au seuil, ce qui donne à penser qu'il en est de même dans de larges domaines de fréquences.

TABLEAU 4.2

Effet de polarisation et valeur des sections efficaces au seuil d'ionisation par 3 photons de l'atome d'hydrogène

| Etat | $\lambda_o$ (Å) | $\sigma'/\sigma$ |
|---|---|---|
| 1 S | 2735,58 | $\frac{3,50\ (-47)}{6,10\ (-47)} = 0,573$ |
| 2 S | 10941,12 | $\frac{8,60\ (-42)}{3,60\ (-42)} = 2,39$ |
| 2 P | " " | $\frac{1,48\ (-41)}{6,01\ (-42)} = 2,46$ |
| 3 S | 24617,52 | $\frac{4,17\ (-39)}{3,32\ (-39)} = 1,79$ |
| 3 P | " " | $\frac{6,22\ (-39)}{3,00\ (-39)} = 2,07$ |
| 3 D | " " | $\frac{6,45\ (-39)}{2,82\ (-39)} = 2,28$ |
| 4 S | 43764,48 | $\frac{1,63\ (-34)}{8,10\ (-35)} = 1,68$ |
| 4 P | " " | $\frac{2,00\ (-34)}{1,03\ (-34)} = 1,94$ |
| 4 D | " " | $\frac{2,69\ (-34)}{1,23\ (-34)} = 2,18$ |
| 5 S | 68382,00 | $\frac{2,40\ (-35)}{1,42\ (-35)} = 1,70$ |
| 5 P | " " | $\frac{3,40\ (-35)}{1,78\ (-35)} = 1,90$ |
| 5 D | " " | $\frac{4,86\ (-35)}{2,29\ (-35)} = 2,12$ |
| 6 S | 98470,08 | $\frac{2,98\ (-35)}{2,99\ (-35)} = 0,995$ |
| 6 P | " " | $\frac{3,89\ (-35)}{3,20\ (-35)} = 1,21$ |
| 6 D | " " | $\frac{5,40\ (-35)}{3,47\ (-35)} = 1,55$ |

Nous terminerons l'exposé de notre travail consacré à l'ionisation par trois photons, sur ces résultats. Le test crucial de la comparaison avec l'expérience sera examiné plus loin, dans un cadre plus général, lorsque nous aborderons ce point délicat à l'occasion de l'étude des processus à plus de trois photons.

# CHAPITRE V

## IONISATION MULTIPHOTONIQUE D'ORDRE SUPERIEUR A TROIS

Le formalisme basé sur l'utilisation de la représentation sturmienne de la fonction de Green coulombienne, mis au point dans le chapitre précédent, peut être facilement adapté à l'étude des processus d'ordres supérieurs. Nous retrouverons donc ci-après les thèmes principaux qui firent l'objet du chapitre précédent : calcul analytique exact des amplitudes puis des sections efficaces d'ionisation multiphotonique et étude de l'effet de polarisation.

Dans ce chapitre, nous traiterons ainsi des processus d'ionisation par $N \leqslant 8$ photons et nous confirmerons, lorsque la comparaison sera possible, les résultats antérieurs de Y. GONTIER et M. TRAHIN. Notons d'ailleurs que l'extension de notre méthode à l'étude des processus d'ordres encore plus élevés ne présente pas de difficulté de principe. Ainsi, nous avons pu envisager le calcul de la section efficace d'ionisation de l'atome d'hydrogène par 12 photons d'un laser au néodyme.

D'autre part, l'étude de l'effet de polarisation y constituera un second sujet important. Le résultat que nous avons obtenu concernant la valeur maximum du rapport des sections efficaces $^{(*)}$ $\sigma'/\sigma$ a d'ailleurs été à l'origine d'une large discussion sur l'efficacité comparée des états de polarisation circulaire et linéaire du rayonnement. Nous en exposerons les grandes lignes ci-après.

Enfin, nous terminerons le chapitre en donnant un aperçu des problèmes soulevés par la comparaison entre la théorie et l'expérience d'une part, et par la description de

---

(*) $\dfrac{\sigma'}{\sigma}$ = section efficace en lumière polarisée circulairement / section efficace en lumière polarisée linéairement

l'interaction d'un faisceau laser de très haute puissance avec la matière d'autre part.

V-1. SECTION EFFICACE D'IONISATION PAR $4 \leqslant N \leqslant 8$ PHOTONS :

Des processus d'ionisation mettant en jeu un nombre élevé de photons (jusqu'à 18 photons pour l'hélium) avaient été mis en évidence (111). Il était donc intéressant, en vue d'une éventuelle comparaison, de généraliser les calculs exposés ci-dessus pour $N = 3$ photons, au cas à $N > 3$.

Signalons tout de suite que pour ces ordres plus élevés, nous n'avons pas explicité la partie angulaire du calcul. La raison en est que d'une part, le nombre de voies ouvertes et donc le nombre d'éléments de matrices à calculer, devient très grand et que d'autre part le calcul correspondant devient très lourd. Nous avons donc mis au point un programme permettant d'effectuer le calcul de la partie angulaire de l'amplitude directement en utilisant l'expression explicite des symboles 3-j de Wigner . La charpente du programme nécessite la mise au point d'une machinerie logique reposant sur les règles de sélection, dont l'application définit les différentes voies accessibles au système, selon l'état de polarisation de la lumière incidente.

Bien que délicate, la réalisation de cette partie de notre programme ne présente pas de difficulté particulière : nous n'y reviendrons donc pas. Cependant, avant de poursuivre nous voudrions signaler qu'à l'occasion du calcul de ces parties angulaires, nous avons obtenu d'intéressantes "règles de sommes" vérifiées par des produits de symboles 3-j. Par exemple :

$$\sum_{L, \text{tous } \lambda_i, \lambda'_i} [L] \left[\lambda_1, \lambda'_1 \ldots \lambda_{N-1}, \lambda'_{N-1}\right] \begin{pmatrix} L & 1 & \lambda_{N-1} \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \lambda_{N-1} & 1 & \lambda_{N-2} \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \ldots \begin{pmatrix} \lambda_1 & 1 & \ell \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} L & 1 & \lambda'_{N-1} \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \ldots \begin{pmatrix} \lambda'_1 & 1 & \ell \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

$$\times \sum_{M, m, \text{tous } \mu_i, \mu'_i} \begin{pmatrix} L & 1 & \lambda_{N-1} \\ -M & 0 & \mu_{N-1} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \lambda_{N-1} & 1 & \lambda_{N-2} \\ -\mu_{N-1} & 0 & \mu_{N-2} \end{pmatrix} \ldots \begin{pmatrix} \lambda_1 & 1 & \ell \\ -\mu_1 & 0 & m \end{pmatrix} \begin{pmatrix} L & 1 & \lambda'_{N-1} \\ -M & 0 & \mu'_{N-1} \end{pmatrix} \ldots \begin{pmatrix} \lambda'_1 & 1 & \ell \\ -\mu'_1 & 0 & m \end{pmatrix}$$

$$= \frac{1}{2N+1} \qquad \text{(V-1.1)}$$

et encore

$$\sum_{L,\,\text{tous}\,\lambda'_i,\lambda_i} [L,\lambda_1,\lambda'_1 \ldots \lambda_{N-1},\lambda'_{N-1}] \begin{pmatrix} L & 1 & \lambda_{N-1} \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \lambda_{N-1} & 1 & \lambda_{N-2} \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \ldots \begin{pmatrix} \lambda_1 & 1 & \ell \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} L & 1 & \lambda'_{N-1} \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \ldots$$

$$\begin{pmatrix} \lambda'_1 & 1 & \ell \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \times \sum_{M,m,\,\text{tous}\,\mu_i,\mu'_i} \begin{pmatrix} L & 1 & \lambda_{N-1} \\ -M \pm 1 & \mu_{N-1} & -\mu_{N-1} \pm 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \lambda_{N-1} & 1 & \lambda_{N-2} \\ \mu_{N-1} & & \mu_{N-2} \end{pmatrix} \ldots \begin{pmatrix} \lambda_1 & 1 & \ell \\ -\mu_1 \pm 1 & & m \end{pmatrix} \begin{pmatrix} L & 1 & \lambda'_{N-1} \\ -M \pm 1 & & \mu'_{N-1} \end{pmatrix} \ldots \begin{pmatrix} \lambda'_1 & 1 & \ell \\ -\mu'_1 \pm 1 & & m \end{pmatrix}$$

$$= \frac{N!}{(2N+1)!!} \qquad \text{(V-1.2)}$$

Dans ces expressions, $[L,\lambda_1,\lambda'_1 \ldots \lambda'_{N-1}]$ a la signification habituelle : $(2L+1)(2\lambda_1+1)\ldots(2\lambda'_{N-1}+1)$.

Une des caractéristiques intéressantes de ces sommes est que leur valeur ne dépend que du paramètre N, lié au nombre de symboles 3-j impliqués, et non du moment angulaire "initial" $\ell$. Nous explicitons la dérivation de ces règles de sommes dans l'annexe D. A notre connaissance, de telles relations ne semblent pas avoir été signalées auparavant. Ajoutons qu'elles se sont révélées d'une grande utilité dans la mise au point des programmes, correspondant au calcul de la partie angulaire des sections efficaces.

Quant à la partie radiale, son évaluation est effectuée d'une manière exactement similaire à celle que nous avons décrite à l'occasion du calcul "à trois photons". L'augmentation du nombre de photons impliqués se traduit simplement par l'insertion (dans l'expression de l'amplitude réduite T) de nouvelles sommes infinies étendues à l'ensemble du spectre "sturmien" de l'atome. Ainsi, l'expression de l'amplitude réduite correspondant à l'ionisation par N photons d'énergie $\omega$, peut s'écrire sous la forme générale suivante :

$$T_{\lambda_1,\lambda_2\ldots\lambda_{N-1},L}(\omega) = C_{n,\ell}\, C_{k,L}\, 2^{N-1}\left[\prod_{q=1}^{N-1}\frac{(2x_q)^{2\lambda_q+1}}{[(2\lambda_q+1)!]^2}\right]\sum_{m_1=\lambda_1+1}^{\infty} K_1 J(n,\ell,\tfrac{1}{n}\,|\,m_1\lambda_1 x_1)$$

$$\times\sum_{m_2=\lambda_2+1}^{\infty} K_2\, J(m_1\lambda_1 x_1\,|\,m_2\lambda_2 x_2)\ldots\ldots\sum_{m_j=\lambda_j+1}^{\infty} K_j\, J(m_{j-1},\lambda_{j-1},x_{j-1}\,|\,m_j,\lambda_j,x_j)$$

$$\ldots\ldots\sum_{m_{N-1}=\lambda_{N-1}+1}^{\infty} K_{N-1}\, J(m_{N-2},\lambda_{N-2},x_{N-2}\,|\,m_{N-1},\lambda_{N-1},x_{N-1})\, J(m_{N-1},\lambda_{N-1},x_{N-1}\,|\,-\tfrac{i}{k},L,ik) \qquad \text{(V-1.3)}$$

où les notations sont les mêmes que dans le chapitre précédent (§ IV-8) et où nous avons posé de plus :

$$K_j = \left(m_j - \frac{1}{x_j}\right)^{-1}\frac{(m_j+\lambda_j)!}{(m_j-\lambda_j-1)!}\quad ;\quad x_j = \left(n^{-2} - 2j\omega\right)^{1/2} \qquad \text{(V-1.4)}$$

Les fonctions J sont données par les expressions (IV-6.11) ou (IV-6.12), (IV-6.13) selon le cas.

Le principal enseignement que l'on peut tirer de la forme de cette expression, est que la partie radiale de l'amplitude, correspondant à un processus à N photons, apparaît sous la forme d'une série multiple d'ordre N-1 dont chaque terme est calculable en principe avec la précision désirée. La programmation du calcul d'une telle série ne pose pas de problème de principe, en dehors des habituelles difficultés d'arrondi évoquées ci-dessus § (IV-6) . Ajoutons quand même que le temps-machine nécessaire pour effectuer le calcul croît rapidement avec l'ordre de la série multiple, c'est-à-dire avec le nombre de photons impliqués. Cet accroissement de la durée des calculs numériques constitue en fait la seule difficulté pratique à laquelle nous nous soyons heurté au cours de l'exploitation des expressions analytiques ci-dessus (V-1.3). Naturellement, une partie non négligeable de notre activité de programmation a été consacrée à la recherche d'astuces permettant de réduire la durée d'utilisation du calculateur.

Nos résultats numériques confirment ceux obtenus indépendamment par Y. GONTIER et M. TRAHIN (118), (122) pour les états 1S et 2S et relatifs à l'ionisation mettant en jeu $N \leqslant 8$ photons. En dehors de la mise en oeuvre d'une méthode différente (susceptible d'autres applications), cette vérification nous semble intéressante en ce qu'elle valide sans ambiguïté les résultats numériques obtenus pour les processus étudiés dans le cadre de la théorie des perturbations. Ce fait

prendra certainement toute son importance lorsqu'il s'agira de déterminer, par comparaison avec l'expérience, les limites d'application de cette théorie vers les très hautes intensités ($I > 10^{14}$ Watts/cm$^2$). Dans ce domaine, l'intérêt de ces résultats théoriques apparaîtra également lors de la comparaison future entre les théories perturbatives et non-perturbatives à la lumière des données expérimentales.

D'autre part, nous voudrions faire ressortir la simplicité formelle de l'expression des amplitudes réduites T : leur programmation ne réclame pas l'utilisation de techniques numériques élaborées puisqu'elle se ramène en fait à l'évaluation de séries dont chaque terme est calculable exactement. Il nous semble donc que cela représente une relative simplification par rapport à la méthode de DALGARNO (15), (17) (mise en oeuvre par Y. GONTIER et M. TRAHIN) qui, pour $N > 2$ repose sur la résolution numérique d'un système d'équations différentielles inhomogènes (voir l'annexe A).

Ainsi, ayant acquis la certitude de la validité de nos résultats numériques pour les états 1S et 2S, nous avons pu étendre nos calculs aux états plus excités. Nous avons étudié notamment l'effet de polarisation en nous basant sur nos données numériques. Nous explicitons ce point dans les paragraphes suivants.

## V-2 EFFET DE POLARISATION ; VALEUR MAXIMUM DU RAPPORT $\sigma'/\sigma$

Rappelons que l'origine de cette étude remonte aux observations expérimentales (135), (136), montrant que les sections efficaces totales d'ionisation par 2 et 3 photons, d'atomes de césium, dépendaient de l'état de polarisation de la lumière incidente. Plus intéressant encore, pour les deux fréquences du rayonnement incident considérées, le rapport $\sigma'/\sigma$ des sections efficaces, se révélait supérieur à 1. Peu après, P. LAMBROPOULOS (137) montrait que les valeurs maxima du rapport étaient de 3/2 et 5/2 respectivement pour l'ionisation par 2 et 3 photons.

Il nous a paru intéressant d'étendre ces résultats au cas de l'ionisation par un nombre N quelconque de photons et d'essayer de prévoir les variations du rapport $\sigma'/\sigma$ en fonction de N. Or, comme nous l'avons montré à l'occasion de l'étude du processus à trois photons, il est possible de prévoir la valeur du maximum théorique que peut atteindre ce rapport, à l'aide d'un raisonnement ne concernant que les parties angulaires des sections efficaces.

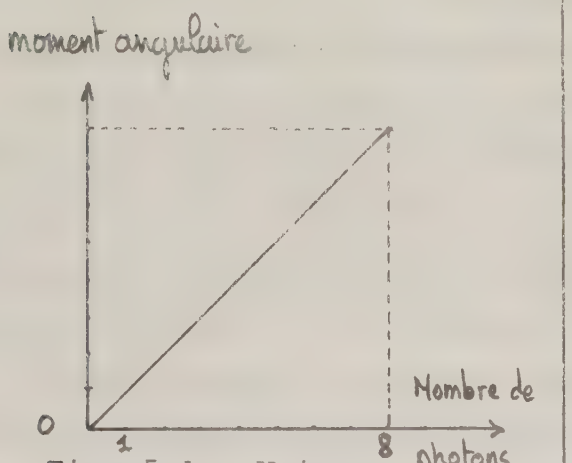



Fig. 5.1 - Voies accessibles en polarisation circulaire $\Delta\ell = \pm 1$, $\Delta m = +1$ pour la polarisation circulaire droite (*)

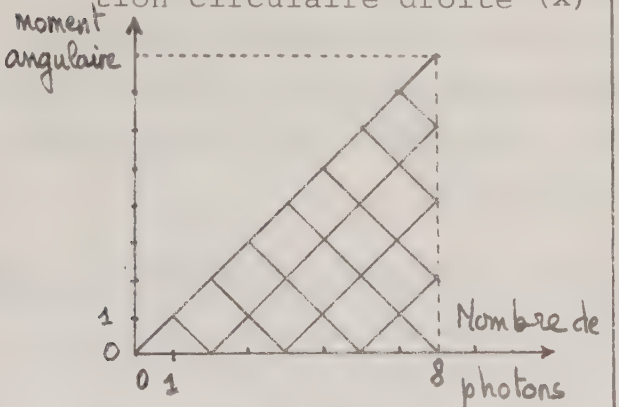



Fig. 5.2 - Voies accessibles en polarisation linéaire
$\Delta\ell = \pm 1, \Delta m = 0$

Nous avons donc suivi la démarche exposée ci-dessus § IV-7, en considérant le cas le plus simple : celui d'un état initial S.

Compte tenu des règles de sélection, les chemins accessibles au système pour chaque type de polarisation peuvent être représentés à l'aide des schémas ci-contre. On constate immédiatement que le nombre de voies ouvertes est beaucoup plus grand en lumière polarisée linéairement. Il est possible d'ailleurs de prévoir le nombre de chemins menant à un état final de moment angulaire donné : nous le montrerons dans le paragraphe suivant.

Revenant aux sections efficaces, elles ont les formes respectives suivantes (voir l'annexe B).

Pour la polarisation circulaire :

$$\sigma' = 4\pi^2 \alpha a_0^2 \omega \left(\frac{I}{2I_0}\right)^{N-1} C'_N \left| T_{1,2,3\ldots N} \right|^2 \qquad \text{(V-2.1)}$$

où l'amplitude réduite $T_{1,2,3\ldots N}$ correspond à la "voie montante" vers l'état final de moment angulaire L = N, atteint après l'absorption de N photons.

Pour la polarisation linéaire :

$$\sigma = 4\pi^2 \alpha a_0^2 \omega \left(\frac{I}{2I_0}\right)^{N-1} \left[ C_N \left| T_{1,2,3\ldots N} \right|^2 + \ldots \right] \qquad \text{(V-2.2)}$$

(*) $\Delta m = -1$ pour la polarisation circulaire gauche.

où les termes omis dans le crochet correspondent aux contributions, toutes positives, des voies menant à des états finals de moments angulaires inférieurs à N : L=N-2, N-4...

En comparant ces deux expressions, il apparait immédiatement que la valeur maximum que peut atteindre le rapport $\sigma'/\sigma$ est égal au rapport des coefficients $C'_N / C_N$ . Or comme nous l'avons vu dans le cas "à trois photons", ces coefficients ne font intervenir que la partie angulaire de l'amplitude.

Plus exactement, leurs expressions respectives dépendent de la règle de sélection imposée sur le nombre quantique magnétique : $\Delta m = +1$ (-1) pour la polarisation circulaire droite (gauche) et $\Delta m = 0$ pour la polarisation linéaire.

A partir des expressions respectives des opérateurs d'interaction dipolaire correspondant à chaque état de polarisation Eq. (IV-5.1) et Eq. (IV-6.2), on obtient aisément :

$$\max.\left(\frac{\sigma'}{\sigma}\right)_N = \frac{C'_N}{C_N} = \prod_{j=1}^{N} \left| \frac{\langle Y_{11} \mid Y_{11} \mid Y_{j-1,j-1} \rangle}{\langle Y_{j0} \mid Y_{10} \mid Y_{j-1,0} \rangle} \right|^2 \qquad \text{(V-2.3)}$$

Puis, en remplaçant les intégrales sur le produit de trois harmoniques sphériques par leurs expressions en fonction des symboles 3-j de Wigner on a :

$$\max.\left(\frac{\sigma'}{\sigma}\right)_N = \prod_{j=1}^{N} \begin{pmatrix} j & 1 & j-1 \\ -j & 1 & j-1 \end{pmatrix}^2 \begin{pmatrix} j & 1 & j-1 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}^{-2} \qquad \text{(V-2.4)}$$

et en explicitant leur valeur (139) :

$$\max.\left(\frac{\sigma'}{\sigma}\right)_N = \frac{(2N-1)!!}{N!} \qquad \text{(V-2.5)}$$

Lorsque N = 2 et 3, on retrouve bien entendu les valeurs mentionnées ci-dessus à savoir respectivement 3/2 et 5/2. Par ailleurs, si N = 1, le rapport est égal à l'unité, ce qui était attendu également.

D'autre part, ce résultat obtenu en 1972 (138) met en évidence de manière simple l'évolution du rapport $\max.(\sigma'/\sigma)_N$ lorsque N croît.

En effet :

$$\frac{(2N-1)!!}{N!} = \frac{(2N)!}{2^N (N!)^2} \qquad \text{(V-2.6)}$$

et pour les N grands, l'application de la formule approchée de Stirling montre que

$$\text{max.} \left(\frac{\sigma'}{\sigma}\right)_N \sim 2^N (\pi N)^{-1/2} \qquad \text{(V-2.7)}$$

Par exemple, pour N = 10 et 20, on obtient respectivement :

$$\text{max.} \left(\frac{\sigma'}{\sigma}\right)_{10} \sim 1{,}8\ 10^2 \qquad \text{(V-2.8)}$$

$$\text{max.} \left(\frac{\sigma'}{\sigma}\right)_{20} \sim 1{,}3\ 10^5 \qquad \text{(V-2.9)}$$

Bien sûr ce résultat ne représente qu'un maximum théorique, établi pour un état initial S. Pourtant il a été montré dans les cas "à deux photons" (121) et "à trois photons" (voir ci-dessus) que d'une part, la formule (V-2.5) restait applicable quel que soit l'état initial considéré et que d'autre part, le rapport réel restait voisin de ce maximum dans de larges domaines de fréquence. Ces considérations nous ont donné à penser que peut être pourrait-il en être de même pour des ordres plus élevés et que, contrairement a toute attente, la lumière polarisée circulairement se révèlerait alors plus efficace que la lumière polarisée linéairement. Nous discuterons de cette éventualité dans le paragraphe suivant.

## V-3. LE MAXIMUM THEORIQUE EST-IL ATTEINT ?

La réponse à cette question a fait l'objet d'un débat dont nous allons résumer l'essentiel ci-après. Comme nous l'avons montré dans le paragraphe précédent, une extrapolation "naïve" des résultats obtenus à 2 et 3 photons donnait à penser que la polarisation circulaire pourrait se révéler beaucoup plus efficace pour les ordres élevés. De nombreux auteurs se sont attachés à vérifier cette hypothèse.

A notre connaissance, les vérifications expérimentales se sont limitées pour l'instant aux processus à deux et trois photons. A la suite des premières expériences de R.A. FOX et al. (135) (136), ont été publiés des résultats obtenus par deux

équipes différentes :

■ P. AGOSTINI et P. BENSOUSSAN (143) qui, en 1974, ont étudié l'ionisation résonante par trois photons, d'atomes de potassium. En utilisant un laser à colorant accordable, il est possible de fixer la fréquence du rayonnement sur l'une ou l'autre des résonances 6S ou 4D et d'explorer leur voisinage.

Les résultats obtenus permettent de vérifier deux faits intéressants :

a) L'ionisation via l'état intermédiaire 6S n'est pas possible en lumière polarisée circulairement : pour la fréquence correspondante, la polarisation linéaire est très largement avantagée.

b) L'ionisation via l'état 4D est possible pour les deux états de polarisation. Cette fois-ci la polarisation circulaire est avantagée. (On remarque, par ailleurs, que cette résonance n'est pas résolue en polarisation linéaire, à cause de la proximité de la résonance intense en 6S et de la largeur de raie du laser).

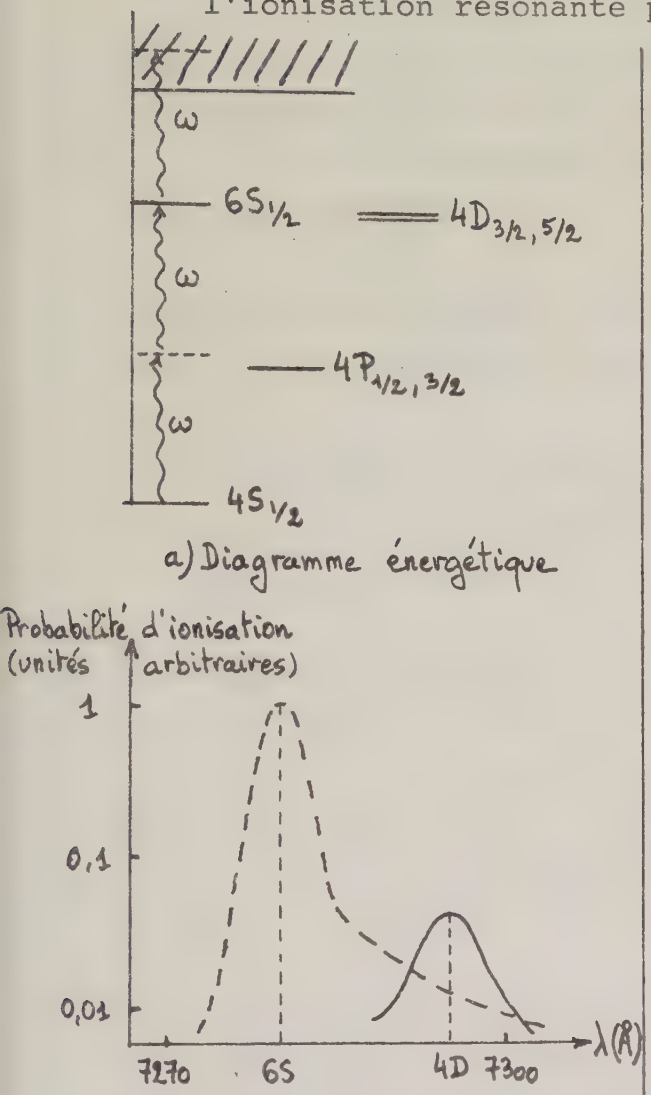



Fig. 5.3 - b) Probabilité d'ionisation (à intensité constante)
----polarisation linéaire
____polarisation circulaire.

■ M.R. CERVENAN et N.R. ISENOR (144) qui ont montré, pour leur part, que pour l'ionisation par trois photons du potassium par le rayonnement d'un laser à rubis (6943 Å), le rapport $\sigma'/\sigma = 2{,}34 \pm 0{,}22$. Ce résultat confirme, dans les limites de l'incertitude estimée, celui obtenu par R.A. FOX et al. (135).

Ces données expérimentales renforcent, pour l'essentiel, l'analyse que nous avions faite à l'occasion de l'étude des phénomènes à trois photons (Cf. § IV-9). Pour les ordres plus élevés, on ne dispose donc que d'informations d'origine théorique. Les travaux correspondants sur l'effet de polarisation peuvent être divisés en deux "familles" selon le type de théorie

utilisée pour décrire le processus multiphotonique :

a) Travaux basés sur la théorie de Reiss (Cf. §V-8)

La première réaction consécutive à la publication de la formule (V-2.5) émanait de H.R. REISS (126). Il faisait remarquer tout d'abord qu'en règle générale :

$$\frac{\sigma'}{\sigma} \leqslant \frac{\sigma'}{\sigma_L} \qquad \text{(V-3.1)}$$

où $\sigma_L$ représente une "section efficace partielle" en lumière polarisée linéairement, relative à une transition vers un état final de moment angulaire L.

Bien sûr, dans le cas de l'ionisation d'un état S où $\sigma = \sigma_N + \sigma_{N-2} + \cdots$, on peut toujours écrire :

$$\frac{\sigma'}{\sigma} \leqslant \frac{\sigma'}{\sigma_N} \qquad \text{(V-3.2)}$$

ce qui, en fait, nous a permis d'établir notre formule (V-2.5), compte tenu du fait que dans ce cas les parties radiales de $\sigma'$ et $\sigma_N$ sont identiques.

L'idée de H.R. REISS reposait sur le fait qu'il peut exister des valeurs de L telles que $\sigma_L > \sigma_N$ ce qui, par conséquent, abaisserait la limite supérieure que peut atteindre le rapport $\sigma'/\sigma$ .

Cette analyse était rendue possible, parce que dans le cadre de sa théorie, une seule amplitude mène à un état final L donné. Il est alors facile, en principe, d'évaluer les ordres de grandeur des différents rapports $\sigma'/\sigma_L$ : il suffit d'avoir une estimation de la valeur du rapport des parties radiales correspondantes. Une évaluation de ce type, faite au seuil de photoionisation, montre que pour les N élevés, $\max.(\sigma'/\sigma) \ll 1$, ce qui semblerait indiquer que la polarisation circulaire devrait être désavantagée.

De nombreux auteurs, que nous avons regroupés dans la référence (147), ont repris et développé les mêmes arguments dans le cadre de la même théorie ; nous n'expliciterons pas ces travaux. Il s'est avéré que la théorie de Reiss a été réfutée récemment (145) (146). Toutefois cela ne met pas en cause la valeur de l'argument proposé. Il nous a donc paru intéressant de voir comment se transposerait cette analyse dans le cadre

de la théorie des perturbations.

Or il apparait qu'une telle analyse approximative n'est possible que dans le cadre de la théorie de Reiss. Lorsqu'on adopte un formalisme perturbatif, la situation se complique quelque peu. S'il est exact que sous certaines conditions les sections efficaces partielles (en polarisation linéaire) peuvent vérifier des relations $\sigma_L > \sigma_N$, cela ne fournit pas pour autant une valeur de max. $(\sigma'/\sigma)$ indépendante de paramètres physiques tels que l'énergie des photons, etc... En effet nous avons vu que pour tout $L \neq N$ il existe plusieurs voies possibles menant à cet état. A chaque chemin sont associées respectivement une partie angulaire et une partie radiale différentes. Il en découle que $\sigma'/\sigma_L$ ne peut pas être obtenu à partir de simples considérations sur les parties angulaires et qu'en particulier ce rapport varie avec la longueur d'onde du rayonnement incident : on ne peut donc évaluer ainsi une limite supérieure absolue du rapport $\sigma'/\sigma$ .

b) Travaux basés sur la théorie des perturbations

L'analyse du problème, pour les états 1S et 2S, proposée par Y. GONTIER et M. TRAHIN (122) est plus convaincante. Ces auteurs se sont basés essentiellement sur l'observation (déjà rencontrée ci-dessus § IV-9) que certaines résonances proches du seuil ne sont pas accessibles en lumière polarisée circulairement. Cela entraine que la polarisation linéaire soit largement avantagée dans le domaine de fréquences compris entre le seuil et la première résonance accessible aux deux états de polarisation.

Pour les états les plus profonds, cette situation s'accentue lorsque N augmente. A partir d'un état S, par exemple, compte tenu de la règle de sélection $\Delta m = +1$, la première résonance apparaissant en polarisation circulaire correspond à une transition vers l'état lié de nombre quantique principal n = N. Pour la polarisation linéaire, par contre, cette restriction n'existe pas et les états excités les plus proches sont généralement accessibles, contribuant ainsi à l'apparition de résonances. D'ailleurs, nos courbes $\sigma = f(\lambda)$, $\sigma' = f(\lambda)$ confirment cette analyse pour les états 1S et 2S :

voir les courbes correspondantes pour l'ionisation par six photons de ces états.

D'autre part, ces auteurs tirent argument du fait, déjà noté ci-dessus § V-2, que le nombre de voies ouvertes est beaucoup plus grand en lumière polarisée linéairement que pour la polarisation circulaire. Lorsque N croît, cette circonstance augmente la probabilité pour qu'on puisse observer la prépondérance d'une section efficace partielle telle que : $\sigma_L > \sigma_H$ ce qui entrainerait $\sigma > \sigma'$.

Il va sans dire que nous souscrivons à cette analyse, valable pour les états S les plus profonds. Cependant, la situation est quelque peu différente si l'on considère les états plus excités. Nous le montrerons dans le paragraphe suivant.

## V-4. EFFET DE POLARISATION POUR LES ETATS EXCITES

L'étude exposée dans le paragraphe précédent, traitait des états 1S et 2S. Les conclusions obtenues pourraient servir éventuellement de base qualitative à une discussion sur l'ionisation multiphotonique de l'hydrogène, de l'hélium voire du lithium. Par contre, il paraît difficile de les transposer en vue de l'interprétation d'expériences éventuelles sur des alcalins, tels que le potassium ou le césium, dans lesquels les électrons optiques impliqués appartiennent à des états S plus excités. Lorsque le photoélectron provient d'une couche p (halogènes, gaz rares...) ou d'une couche d (Hg) les données du problème sont encore plus dissemblables. Dans ces derniers cas en effet, le nombre de voies accessibles en polarisation circulaire augmente notablement. L'ensemble de ces raisons nous a incité à approfondir l'étude de l'effet de polarisation en considérant le cas des états excités.

Nous allons procéder en trois étapes : tout d'abord nous calculerons le nombre de voies ouvertes en fonction du nombre de photons absorbés et du moment angulaire de l'état initial. Ensuite nous évaluerons, comme pour le cas à trois photons, les sections efficaces au seuil afin d'avoir au moins une indication sur le comportement global des sections efficaces. Enfin, nous observerons sur un cas concret, pour un état de nombre quantique principal donné, l'influence de la sous-couche d'origine sur le rapport $\sigma'/\sigma$.

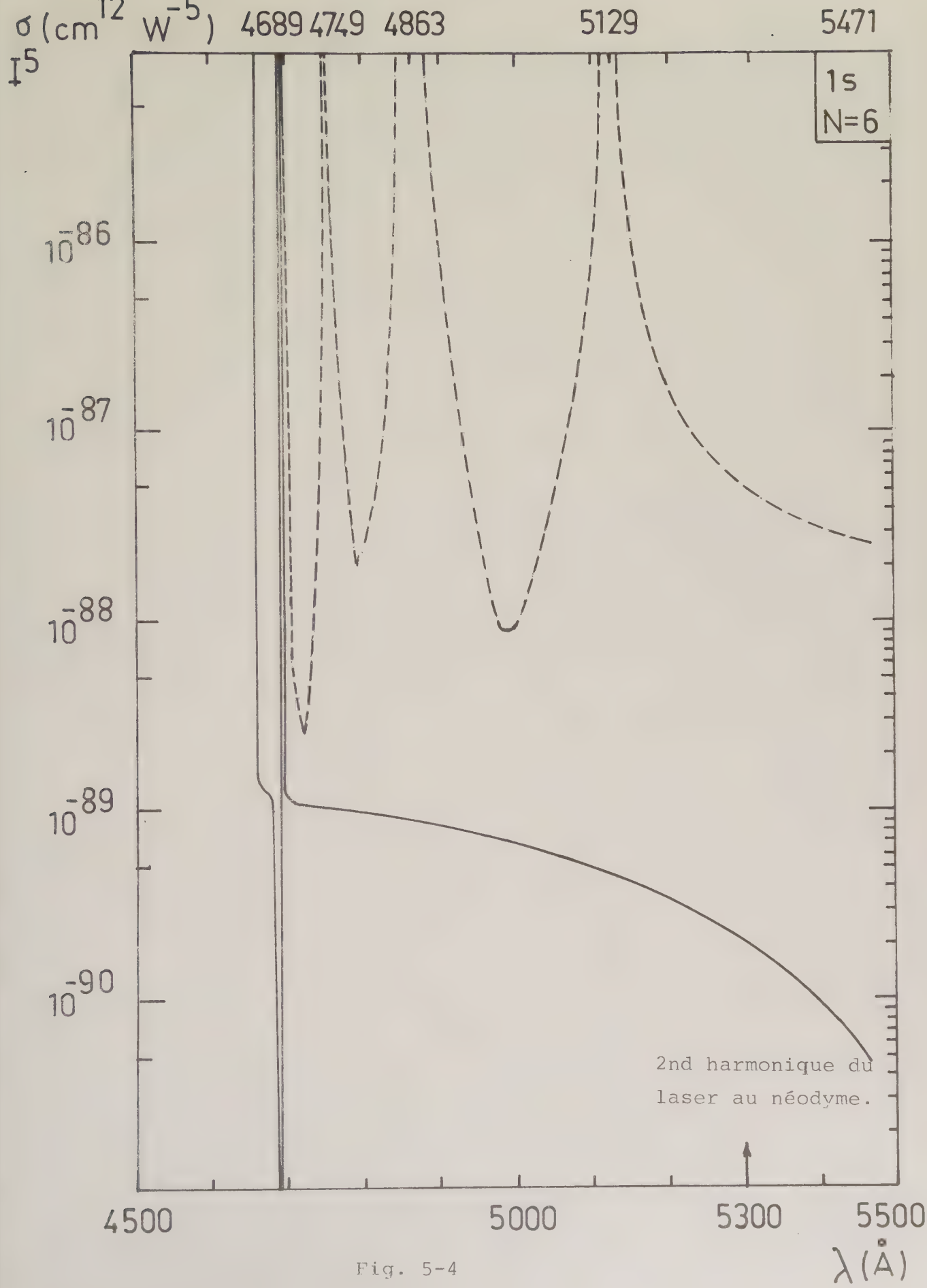

σ (cm^12 W^-5)
I^5
4689
4749
4863
5129
5471
1s
N=6
10^-86
10^-87
10^-88
10^-89
10^-90
2nd harmonique du
laser au néodyme.
4500
5000
5300
5500
λ (Å)

Fig. 5-4

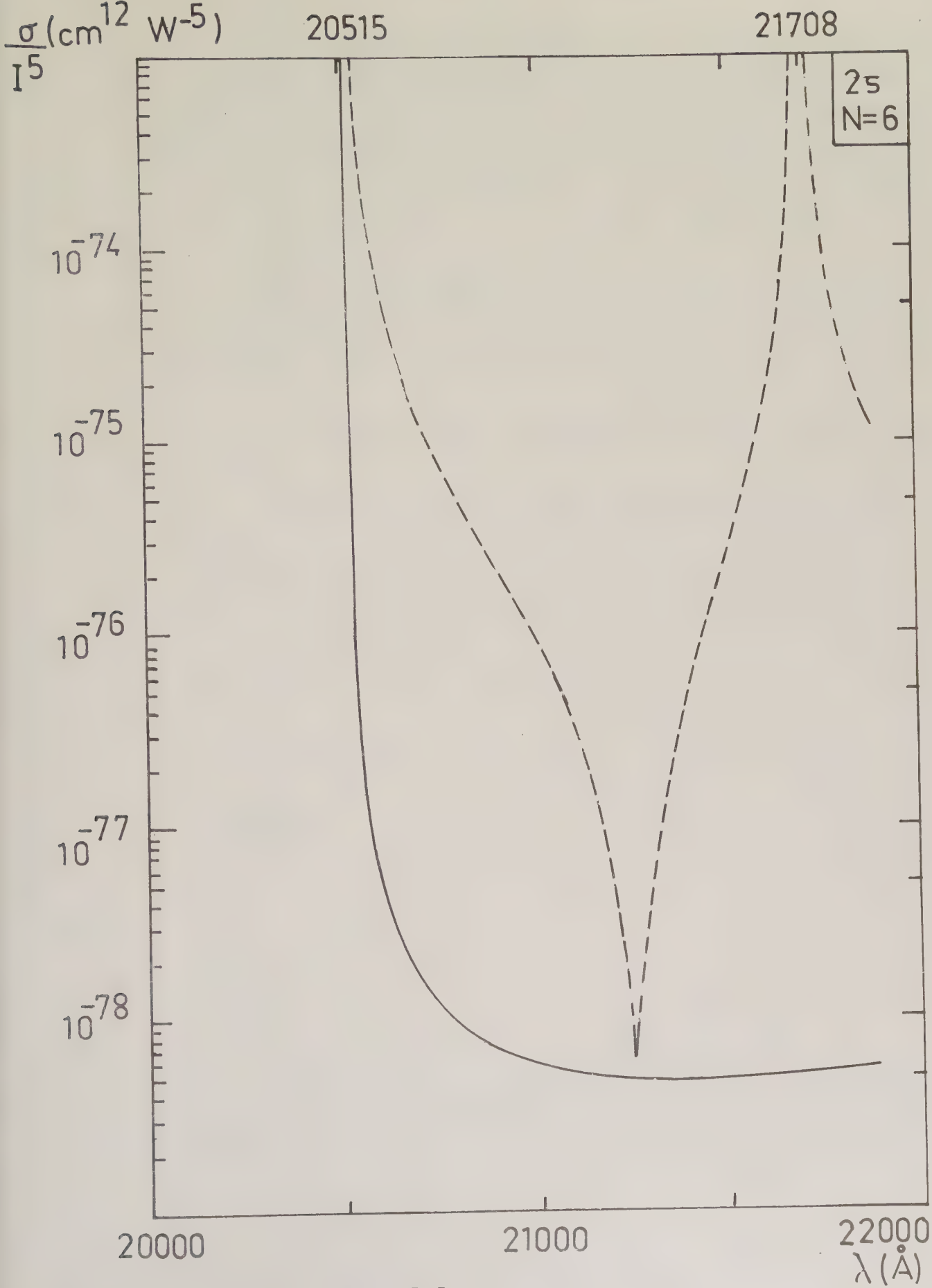

σ/I^5 (cm^12 W^-5)
20515
21708
2s
N=6
10^-74
10^-75
10^-76
10^-77
10^-78
20000
21000
22000
λ(Å)

Fig. 5-5

Soit $\ell$ le moment angulaire de l'état atomique initial et L le moment angulaire du photoélectron éjecté à la suite de l'absorption de N photons par le système atomique. Comme nous l'avons vu précédemment, compte tenu de la règle de sélection $\Delta\ell = \pm 1$, seuls sont accessibles les états finals tels que $L = \ell + N, \ell + N - 2 \ldots, \ell + N - 2j \ldots$ où j est un entier positif ou nul.

La limite supérieure que peut atteindre j dépend de deux facteurs (voir l'annexe C) : d'une part des valeurs respectives de $\ell$ et N et d'autre part de l'état de polarisation. Plus concrètement :

a) si $\ell \geq N$ : on a $j \leq N$ quel que soit l'état de polarisation

b) si $\ell < N$ ( cas le plus fréquent) on a respectivement :

en polarisation linéaire: $\begin{cases} j \leq (\ell+N)/2 & \text{si } \ell+N \text{ pair} \\ j \leq (\ell+N-1)/2 & \text{si } \ell+N \text{ impair} \end{cases}$ (V-4.1)

en polarisation circulaire : $j \leq \ell$ (V-4.2)

Cette situation peut être représentée à l'aide des figures suivantes :

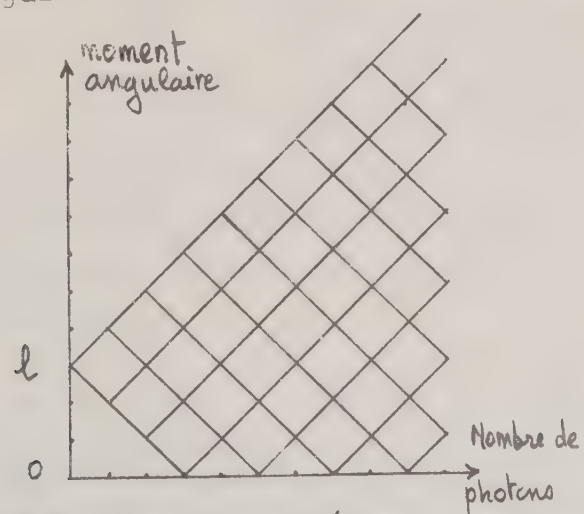



fig.5.6 Polarisation linéaire
$\ell \neq 0$

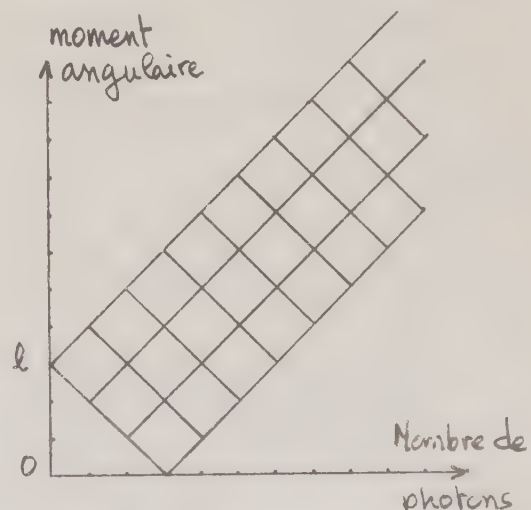



fig 5.7 Polarisation circulaire
$\ell \neq 0$

Avec ces conditions en mémoire on montre que le nombre total de voies différentes ($\ell \to \lambda_1 \to \lambda_2 \ldots \lambda_{N-1} \to L$ ) menant

à l'un quelconque des états finals accessibles est donné par la formule générale :

$$\nu_N(\ell \to \ell+N-2j) = \binom{N}{j} - \binom{N}{j-\ell-1} \qquad (V\text{-}4.3)$$

où le second coefficient du binôme doit être considéré comme nul pour $j \leqslant \ell$ . Cette dernière restriction portant sur les valeurs permises de j, coïncide avec la condition (V-4.2) imposée dans le cas de la polarisation circulaire : le membre de droite de (V-4.3) se réduit alors au premier terme.

A l'aide de ce résultat, il est possible d'obtenir le nombre total de voies ouvertes $\mathcal{N}_N(\ell)$ à partir d'un état initial donné :

$$\mathcal{N}_N(\ell) = \sum_j \nu_N(\ell \to \ell+N-2j) \qquad (V\text{-}4.4)$$

On obtient selon le cas :

1°) si $\ell \geqslant N$ : $\mathcal{N}_N(\ell) = 2^N$ quel que soit l'état de polarisation

2°) si $\ell < N$

a) en polarisation linéaire : $$\mathcal{N}_N(\ell) = \sum_{i=0}^{\ell} \binom{N}{\left\{\frac{N-\ell}{2}\right\}-i} \qquad (V\text{-}4.5)$$

où $\left\{\frac{N-\ell}{2}\right\}$ représente le premier entier $\leqslant \frac{N-\ell}{2}$

b) en polarisation circulaire : $$\mathcal{N}'_N(\ell) = \sum_{i=0}^{\ell} \binom{N}{i} \qquad (V\text{-}4.6)$$

L'ensemble des résultats précédents montre que, pour un état initial de nombre quantique $\ell$ petit, le nombre total de voies ouvertes est beaucoup plus grand en polarisation linéaire qu'en polarisation circulaire. Dans le tableau suivant, nous donnons quelques ordres de grandeur caractéristiques des nombres de voies ouvertes pour chaque état de polarisation .

Les chiffres apparaissant dans le tableau (5.1) permettent de mettre en évidence plusieurs caractéristiques de l'effet de polarisation.

Tableau 5-1

| Etat \ N | | 2 | 4 | 6 | 8 | 12 | 20 |
|---|---|---|---|---|---|---|---|
| $\ell=0$ | lin | 2 | 6 | 20 | 70 | 924 | 184 756 |
| | circ | 1 | 1 | 1 | 1 | 1 | 1 |
| $\ell=1$ | lin | 3 | 10 | 35 | 126 | 1716 | 352 716 |
| | circ | 3 | 5 | 7 | 9 | 13 | 21 |
| $\ell=2$ | lin | 4 | 14 | 50 | 182 | 2508 | 520 676 |
| | circ | 4 | 11 | 22 | 37 | 79 | 211 |

Pour les états S, on observe que, si l'on s'en tient au nombre de voies, l'avantage de la polarisation linéaire s'accentue très rapidement lorsque N croît : $\mathcal{N}_N(s)$ varie asymptotiquement comme $\sqrt{\frac{2}{\pi N}}\ 2^N$, alors qu'une seule voie reste accessible pour la polarisation circulaire.

Si l'on considère les états non-S, cet avantage se maintient, bien qu'à un degré moindre. Ainsi on vérifie que :

$$\frac{\mathcal{N}_N'(d)}{\mathcal{N}_N(d)} \geqslant \frac{\mathcal{N}_N'(p)}{\mathcal{N}_N(p)} \geqslant \frac{\mathcal{N}_N'(s)}{\mathcal{N}_N(s)}$$

Cette constatation nous a incité à vérifier dans un cas concret si cette variation du nombre des voies ouvertes avait une répercussion sur les valeurs des sections efficaces (voir ci-après le § V-5).

D'autre part on constate que, pour les nombres de photons importants, le nombre de voies ouvertes en polarisation linéaire devient extraordinairement grand. Par exemple, si l'on considère l'ionisation de l'hélium ionisé He II, dans son état fondamental, par le rayonnement d'un laser au néodyme ($\lambda$ = 10600 Å) le processus nécessite 47 photons (!!). Le nombre de voies différentes ouvertes est alors $\sim 1{,}6 \cdot 10^{13}$. Si l'on souhaitait obtenir des données numériques, en estimant le temps de calcul de chaque amplitude radiale T au minimum à une minute de temps machine (0,1 minute pour 12 photons sur l'UNIVAC 1110)

l'évaluation de la section efficace en polarisation linéaire nécessiterait, dans l'état actuel des techniques, environ 30 millions d'années... Ceci montre, s'il en était besoin, la nécessité de trouver une approche autre que la théorie des perturbations dans le domaine des très hautes intensités.

En poursuivant ces extrapolations (hasardeuses !) vers les très grands nombres de photons on atteint les chiffres fantastiques suivants :

$$\mathcal{N}_{100}(s) \sim 10^{29} ;$$

$$\mathcal{N}_{200}(s) \sim 10^{59} ;$$

Le nombre de voies permises devient alors supérieur au nombre d'atomes présents, voire au "nombre de photons" contenus dans une impulsion laser. Le problème du choix statistique des chemins les plus probables sera alors un préalable à toute tentative d'interprétation.

Cependant le même tableau possède peut-être en lui même un commencement de réponse : si le phénomène est observable en polarisation circulaire, malgré l'ordre de grandeur très petit de la section efficace, alors, la comparaison entre théorie et expérience sera sans doute facilitée. Dans cette optique, nous avons évalué la section efficace d'ionisation par 12 photons de l'atome d'hydrogène dans l'état fondamental pour $\lambda$ = 10 600 Å (Laser au néodyme) en polarisation circulaire. Voir ci-après le § (V-6).

Revenant à des réflexions moins spéculatives et poursuivant notre étude sur l'effet de polarisation, nous avons tenté de chiffrer nos données sur ce sujet.

## V-5 EFFET DE POLARISATION : RESULTATS NUMERIQUES POUR LES ETATS EXCITES

Nous avons scindé cette étude en deux parties distinctes: d'une part le comportement du rapport $\sigma'/\sigma$ au seuil de photoionisation et d'autre part l'évolution de ce même rapport lorsqu'on passe d'une sous-couche à une autre pour un même nombre quantique principal.

1) Comportement au seuil

Comme nous l'avions remarqué lors de l'étude correspondante à trois photons, le comportement des sections efficaces au seuil de photoionisation fournit une indication intéressante sur l'effet de polarisation. Le formalisme est semblable à celui que nous avons explicité dans le paragraphe(IV-8 ). Les résultats sont exposés dans le tableau suivant.

Avant de les commenter, il convient de signaler que les résultats indiqués pour quatre et huit photons ont été obtenus après avoir levé si besoin en était les indéterminations dues aux résonances apparaissant au seuil. Par exemple, pour l'ionisation par quatre photons d'un système initialement dans l'état de nombre quantique principal n, l'énergie d'un photon (exprimée en unités atomiques) doit être, au seuil :

$$\omega_s = \frac{1}{4} \cdot \frac{1}{2n^2}$$

Dans ces conditions, un des dénominateurs contenus dans l'expression de l'amplitude T, à savoir celui qui est de la forme $E_n + 3\omega_s - E_{n'}$ , s'annule lorsque n' = 2 n (n' caractérisant l'un des états intermédiaires ) : cette annulation fait apparaître une résonance. Deux éventualités sont alors à considérer selon que cet état n' est accessible ou non en polarisation circulaire.

a) Si, compte tenu de la règle de sélection $\Delta m = +1$ l'état n' = 2n ne peut pas être atteint en polarisation circulaire, la section efficace correspondante $\sigma'$ reste finie au seuil. Par contre, la section efficace relative à la polaristion linéaire devient infinie et le rapport $\sigma'/\sigma \to 0$.

b) Si l'état n' = 2 n est accessible pour les deux états de polarisation chaque section efficace $\to \infty$ . Cependant on montre aisément que le rapport $\sigma'/\sigma$ reste fini , le même terme divergent apparaissant dans $\sigma$ et $\sigma'$. Les résultats figurant dans ce tableau ont été obtenus ainsi pour 4 et 8 photons.

Revenant à l'analyse des données figurant dans ce tableau, on peut observer plusieurs faits intéressants .

Tout d'abord, on obtient une confirmation du fait

que pour les états 1S et 2S la polarisation circulaire est très désavantagée lorsque N > 4. Par contre la situation est moins claire pour les états S plus excités.

D'autre part, on peut vérifier que, à quelques rares exceptions près, pour un nombre quantique principal n donné le rapport varie dans le sens attendu :

$$\left(\frac{\sigma'}{\sigma}\right)_d > \left(\frac{\sigma'}{\sigma}\right)_p > \left(\frac{\sigma'}{\sigma}\right)_s$$

Cependant la progression reste faible et n'est pas exactement proportionnelle à l'augmentation relative du nombre de voies en polarisation circulaire.

2) Variation de l'effet de polarisation en fonction de la sous-couche d'origine.

Nous avons choisi d'étudier l'ionisation par 6 photons à partir des couches 3s, 3p, 3d. Notre choix a été motivé par l'examen des résultats obtenus au seuil : pour les états ci-dessus le rapport $\sigma'/\sigma$ augmentait d'un ordre de grandeur en passant d'une sous-couche à l'autre, ce qui paraissait favorable a priori pour étudier l'effet de polarisation au seuil.

Pour chacun de ces états, nous avons donc tracé les courbes de variation des sections efficaces et de leur rapport en fonction de la longueur d'onde du rayonnement incident. Voir les courbes ci-contre.

Les résultats obtenus montrent que le plus souvent $(\sigma'/\sigma)_{3d} > (\sigma'/\sigma)_{3p}$ mais que par contre : $(\sigma'/\sigma)_{3s} > (\sigma'/\sigma)_{3p}$ dans de large domaines de fréquence. Ceci indique qu'il est difficile de tirer des conclusions générales à partir d'un simple raisonnement sur les nombres de voies ouvertes. Par ailleurs même lorsque le rapport $\sigma'/\sigma$ croît lorsqu'on passe d'un état à un autre plus excité, l'accroissement relatif reste en deça de l'augmentation relative du nombre de voies ouvertes en polarisation circulaire. Cette observation confirme la prépondérance de la "voie montante" $\ell \to \ell+1 \to \cdots \ell+N$ sur les autres chemins. Cela rejoint d'ailleurs la constatation, classique en physique.

Rapport des sections efficaces $\frac{\sigma'}{\sigma}$ au seuil d'ionisation

| Etat \ N | 3 | 4 | 5 | 6 | 7 | 8 |
|---|---|---|---|---|---|---|
| 1S | $\frac{3,50(-47)}{6,10(-47)} = 5,73(-1)$ | $\frac{\cdots}{\infty} = 0$ | $\frac{1,83(-76)}{6,93(-75)} = 2,64(-2)$ | $\frac{4,49(-91)}{2,54(-88)} = 1,77(-3)$ | $\frac{1,14(-105)}{1,33(-101)} = 8,53(-5)$ | $\frac{\cdots}{\infty} = 0$ |
| 2S | $\frac{8,60(-42)}{3,60(-42)} = 2,39$ | $\frac{\infty}{\infty} = 1,30(-1)$ | $\frac{4,45(-67)}{6,63(-66)} = 6,71(-2)$ | $\frac{5,45(-79)}{1,16(-75)} = 4,70(-4)$ | $\frac{7,74(-91)}{2,04(-89)} = 3,80(-2)$ | $\frac{\cdots}{\infty} = 0$ |
| 2P | $\frac{1,48(-41)}{6,01(-42)} = 2,46$ | | $\frac{3,86(-66)}{9,20(-66)} = 4,19(-1)$ | $\frac{2,60(-78)}{9,88(-76)} = 2,63(-3)$ | $\frac{1,40(-90)}{3,49(-89)} = 4,02(-2)$ | |
| 3S | $\frac{4,17(-39)}{3,32(-39)} = 1,79$ | $\frac{\infty}{\infty} = 1,92$ | $\frac{8,65(-60)}{6,80(-59)} = 1,27(-1)$ | $\frac{1,27(-72)}{5,55(-71)} = 2,30(-2)$ | $\frac{2,80(-79)}{4,84(-77)} = 5,78(-3)$ | $\frac{\cdots}{\infty} = 0$ |
| 3P | $\frac{6,22(-39)}{3,00(-39)} = 2,07$ | | $\frac{1,41(-60)}{7,69(-59)} = 1,83(-2)$ | $\frac{9,87(-72)}{7,97(-71)} = 1,24(-1)$ | $\frac{7,93(-80)}{5,76(-77)} = 1,38(-3)$ | |
| 3D | $\frac{6,45(-39)}{2,82(-39)} = 2,28$ | | $\frac{1,58(-59)}{6,18(-59)} = 2,55(-1)$ | $\frac{1,34(-76)}{8,75(-71)} = 1,53$ | $\frac{1,51(-80)}{4,34(-77)} = 3,49(-4)$ | |
| 4S | $\frac{1,63(-34)}{8,10(-35)} = 1,68$ | $\frac{\infty}{\infty} = 2,91$ | $\frac{1,23(-54)}{2,99(-55)} = 4,12$ | $\frac{7,53(-63)}{1,86(-62)} = 4,05(-1)$ | $\frac{5,38(-75)}{5,94(-75)} = 9,07(-1)$ | $\frac{\infty}{\infty} = 1,32(-2)$ |
| 4P | $\frac{2,00(-34)}{1,03(-34)} = 1,94$ | | $\frac{2,93(-54)}{4,87(-55)} = 6,01$ | $\frac{7,95(-63)}{2,23(-62)} = 3,57(-1)$ | $\frac{4,68(-75)}{8,24(-75)} = 5,67(-1)$ | |
| 4D | $\frac{2,69(-34)}{1,23(-34)} = 2,18$ | | $\frac{6,43(-54)}{8,84(-55)} = 7,28$ | $\frac{3,80(-63)}{2,39(-62)} = 1,59(-1)$ | $\frac{4,32(-76)}{1,09(-74)} = 3,98(-2)$ | |
| 5S | $\frac{2,40(-35)}{1,42(-35)} = 1,70$ | $\frac{\infty}{\infty} = 1,99$ | $\frac{4,38(-51)}{1,37(-52)} = 3,20$ | $\frac{5,75(-63)}{2,41(-61)} = 2,38(-2)$ | $\frac{1,70(-69)}{4,40(-69)} = 3,26(-1)$ | $\frac{\infty}{\infty} = 4,27(-3)$ |
| 5P | $\frac{3,40(-35)}{1,78(-35)} = 1,90$ | | $\frac{7,89(-51)}{1,87(-51)} = 4,21$ | $\frac{1,42(-63)}{2,57(-61)} = 5,53(-3)$ | $\frac{2,31(-69)}{4,94(-69)} = 4,67(-1)$ | |
| 5D | $\frac{4,86(-35)}{2,29(-35)} = 2,12$ | | $\frac{1,48(-50)}{2,76(-51)} = 5,34$ | $\frac{1,53(-62)}{2,59(-61)} = 5,90(-2)$ | $\frac{2,50(-69)}{5,40(-69)} = 4,64(-1)$ | |
| 6S | $\frac{2,98(-35)}{2,99(-35)} = 9,95(-1)$ | $\frac{\infty}{\infty} = 3,61$ | $\frac{4,36(-50)}{1,31(-50)} = 3,32$ | $\frac{6,33(-58)}{9,57(-59)} = 6,61$ | $\frac{5,16(-63)}{2,19(-62)} = 2,36(-1)$ | $\frac{\infty}{\infty} = 6,68(-1)$ |
| 6P | $\frac{3,89(-35)}{3,20(-35)} = 1,21$ | | $\frac{7,52(-50)}{1,79(-50)} = 4,23$ | $\frac{1,15(-57)}{1,38(-58)} = 8,37$ | $\frac{7,13(-63)}{2,35(-62)} = 3,03(-1)$ | |
| 6D | $\frac{5,40(-35)}{3,47(-35)} = 1,55$ | | $\frac{1,42(-49)}{2,68(-50)} = 5,29$ | $\frac{2,51(-57)}{2,50(-58)} = 10,1$ | $\frac{9,21(-63)}{2,51(-62)} = 3,66(-1)$ | |

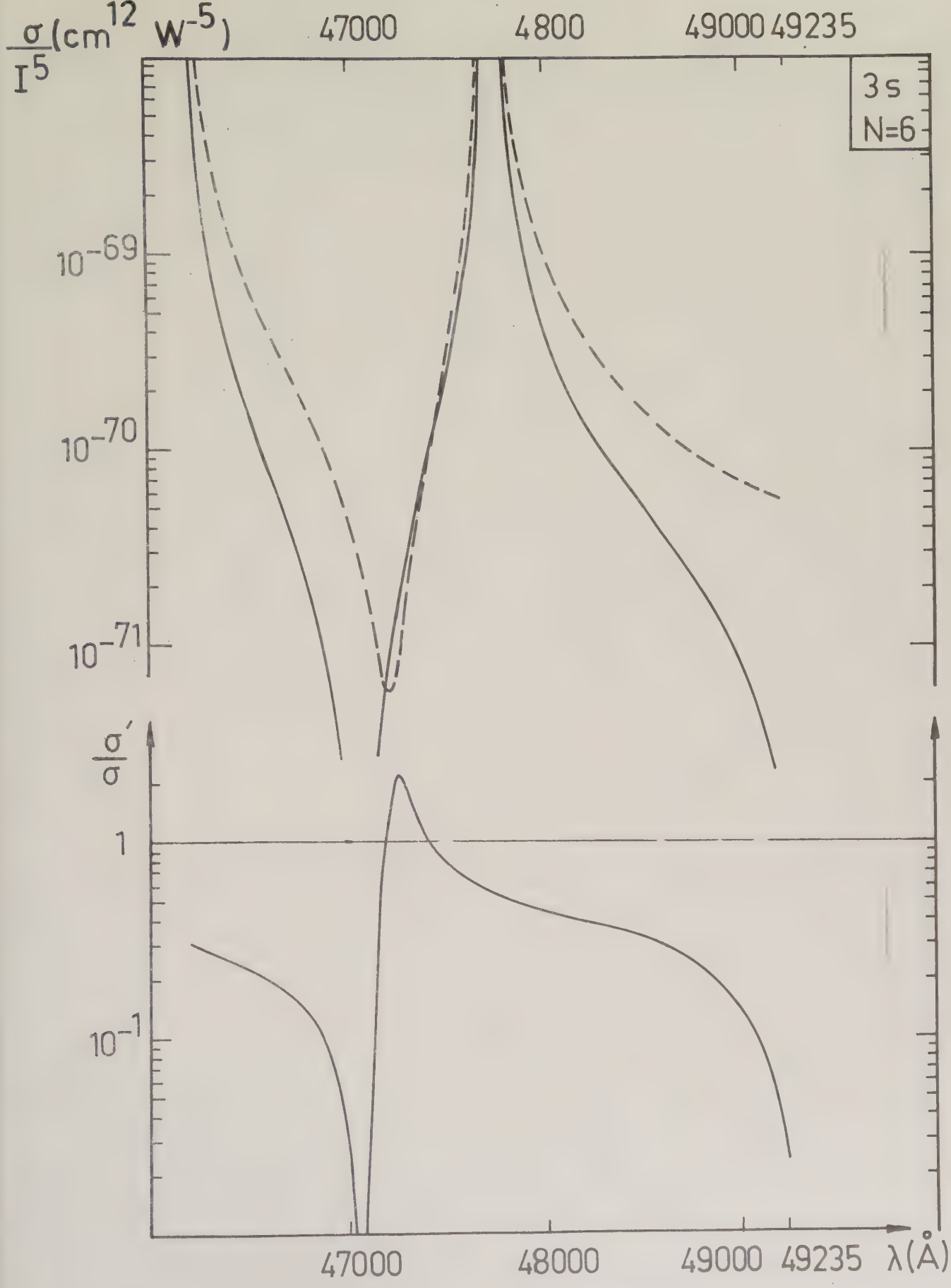

σ/I^5 (cm^12 W^-5)
47000
4800
49000 49235
3s
N=6
10^-69
10^-70
10^-71
σ'/σ
1
10^-1
47000
48000
49000 49235
λ(Å)

Fig. 5-8

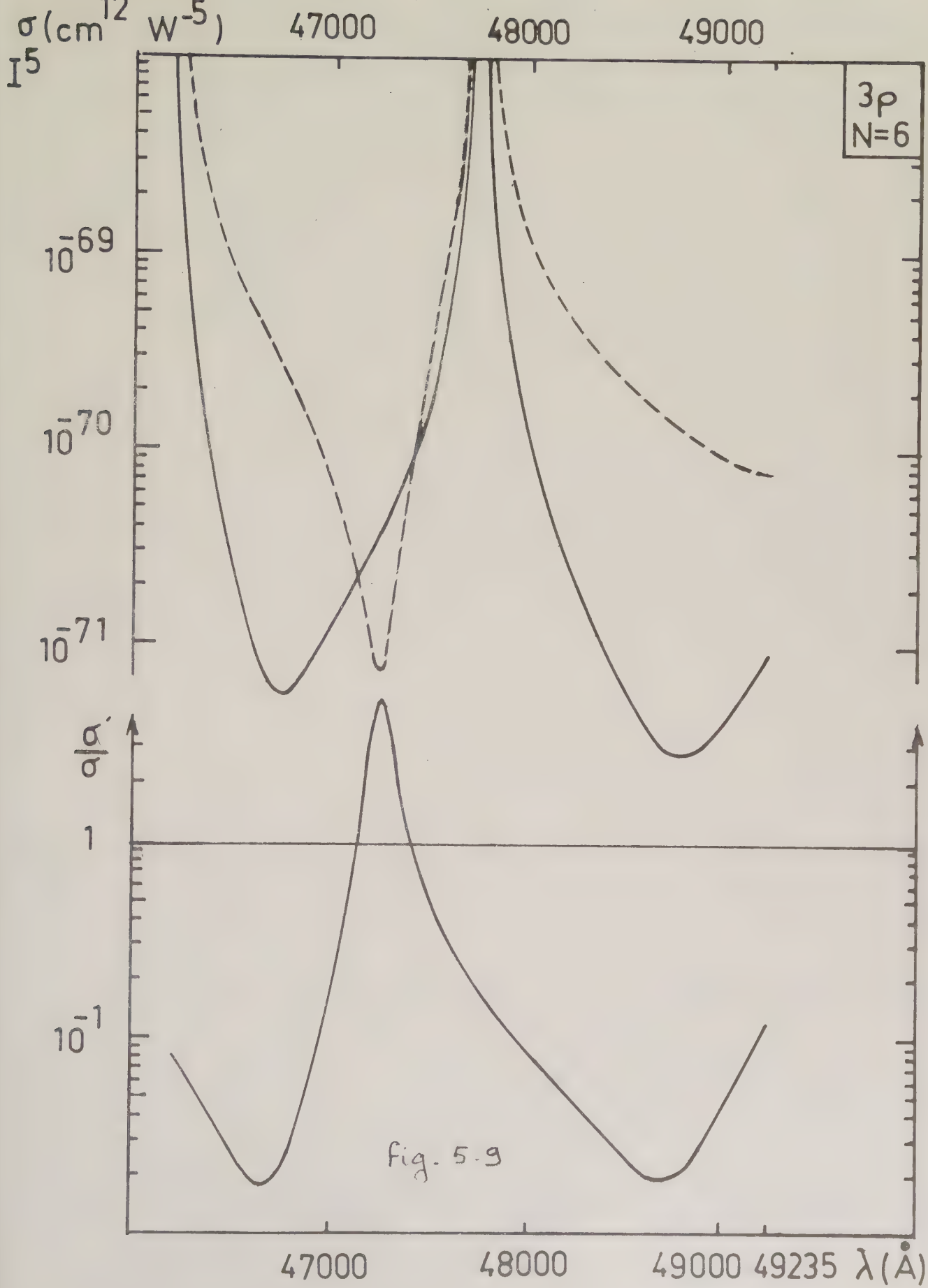

σ(cm^12 W^-5)
I^5
47000
48000
49000
3p
N=6
10^-69
10^-70
10^-71
σ'/σ
1
10^-1
47000
48000
49000
49235
λ(Å)

fig. 5.9

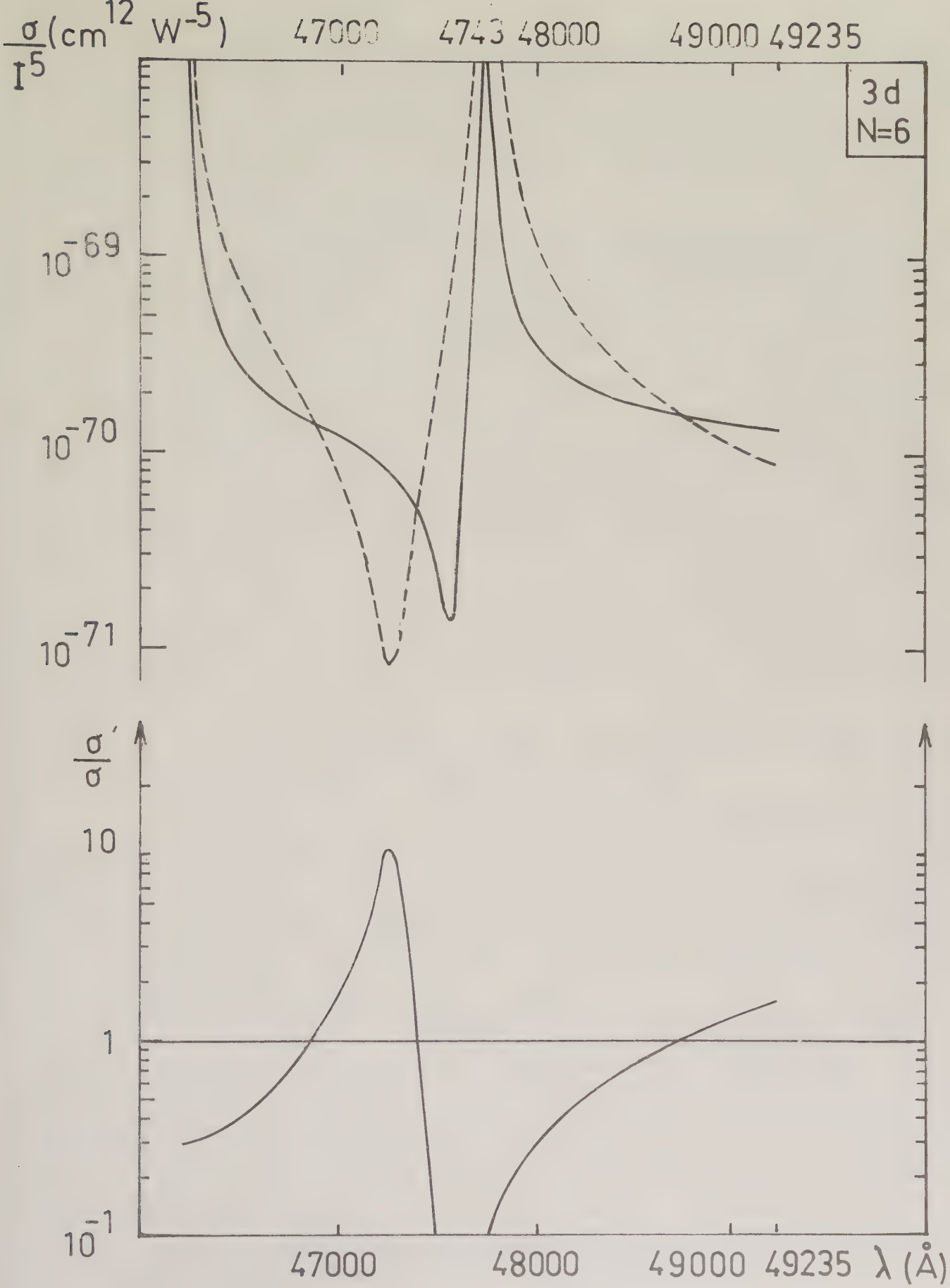

σ/I^5 (cm^12 W^-5)
47000
4743
48000
49000
49235
3d
N=6
10^-69
10^-70
10^-71
σ'/σ
10
1
10^-1
47000
48000
49000
49235
λ (Å)

Fig. 5-10

atomique, selon laquelle une transition radiative au cours de laquelle les nombres quantiques principal n et orbital $\ell$ varient dans le même sens est plus probable qu'une transition au cours de laquelle ils varieraient en sens inverse : voir par exemple la référence(20) § 61 $\alpha$, 2.

L'analyse des résultats numériques présentés dans ce paragraphe montre que la polarisation circulaire est beaucoup moins défavorisée que ne le laissait prévoir la comparaison des nombres de voies accessibles. Le seul facteur déterminant semble être en fait lié à la présence de résonances, communes ou non, aux deux états de polarisation. En effet, dans le domaine de fréquences où les résonances sont présentes pour les deux états de polarisation, le petit nombre de voies accessibles en polarisation circulaire est compensé par les ordres de grandeur supérieurs des parties radiales et angulaires correspondantes.

Pour les très grands nombres de photons cependant, l'avantage de la polarisation linéaire s'accentue car le nombre de résonances, accessibles seulement pour cet état de polarisation, augmente régulièrement en fonction du nombre de photons.

Nous résumons ci-après les principaux résultats obtenus dans cette étude de l'effet de polarisation :

a) l'effet de polarisation dépend fortement de l'état atomique initial considéré.

b) pour les nombres de photons, mis en jeu le plus souvent dans les expériences $N \leqslant 3$, la polarisation circulaire est avantagée et le rapport $\sigma'/\sigma$ reste voisin du maximum possible, dans de larges domaines de fréquence.

c) pour les nombres de photons plus élevés $4 \leqslant N \leqslant 8$, le phénomène a tendance à s'inverser et pour les états $n = 1$ et $n = 2$ la polarisation linéaire est avantagée. Pour les états plus excités, par contre, on ne peut pas tirer de conclusion générale.

d) pour les nombres de photons encore plus élevés $N > 8$ on peut prévoir que la polarisation linéaire restera très avantagée dans un large domaine de fréquence, même pour les états excités...

## V-6. PROBLEMES SOULEVES PAR LA COMPARAISON AVEC L'EXPERIENCE . IONISATION PAR 12 PHOTONS DE L'ATOME H.

Nous en arrivons à un point de notre exposé à partir duquel il n'est plus possible d'éluder l'obligation de procéder à la comparaison avec l'expérience. Cette comparaison représente en fait le seul critère absolu permettant de juger de la validité d'une description théorique.

Il se trouve malheureusement que, dans le cas de l'ionisation multiphotonique, la comparaison est particulièrement malaisée. En effet, on se heurte à des difficultés de natures différentes tenant d'une part au modèle choisi dans la description théorique et d'autre part aux caractéristiques propres des expériences. Nous rendrons compte ci-après de ces deux aspects du problème, mais auparavant nous avons pensé qu'il était utile de donner un aperçu des dispositifs expérimentaux utilisés.

Nous décrivons très schématiquement ci-après un montage typique (111)

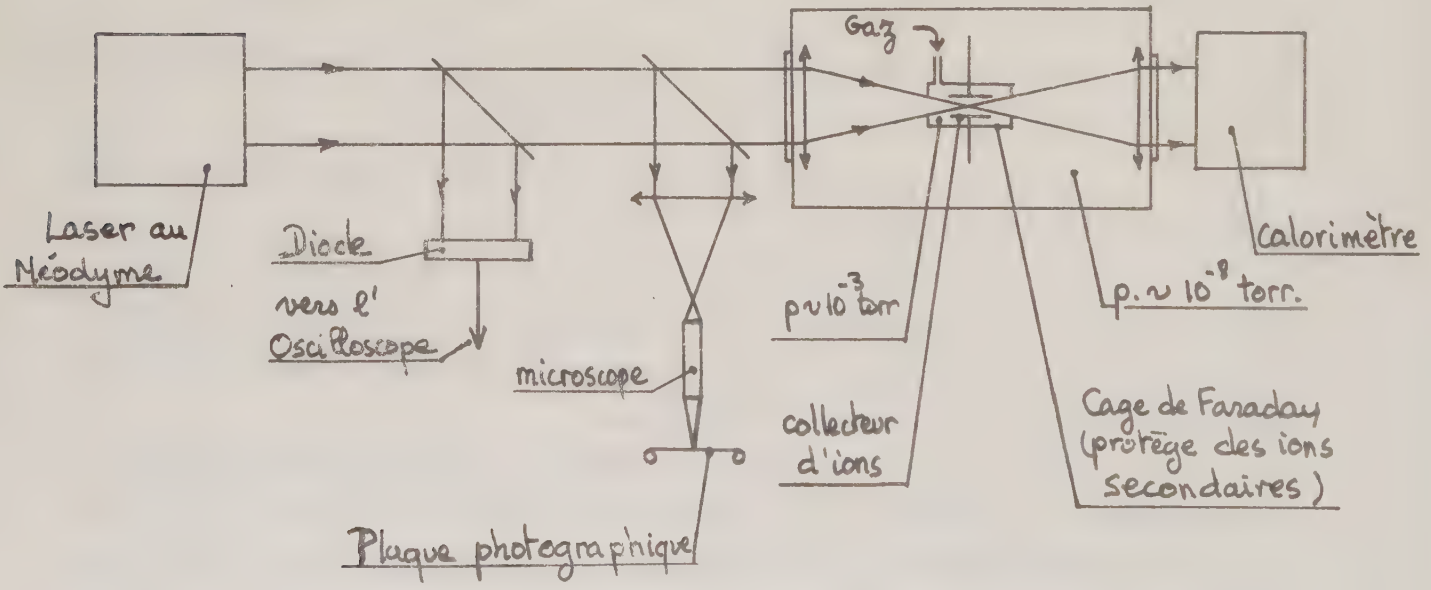



Fig. 5-11. Schéma de principe d'un montage d'étude de l'ionisation multiphotonique des gaz (111).

Le faisceau d'un laser (le plus souvent au néodyme) est focalisé dans une très petite région (volume focal $\sim 10^{-6} cm^3$)

d'une enceinte (jouant le rôle de cage de Faraday) où l'on a introduit le gaz étudié sous une pression réduite ($p \sim 10^{-3}$ torr) (*). Lorsqu'une impulsion laser intense ($I \simeq 10^{10}$ à $10^{13}$ Watts/cm$^2$). traverse le volume d'interaction, une grande partie des atomes présents sont ionisés. Les ions ainsi formés sont collectés sur les plaques d'un condensateur entre lesquelles règne un champ électrique ($E \sim 100$ V/cm) : le signal obtenu est directement proportionnel au nombre d'ions formés.

Dès les premières expériences de ce type, on a pu constater que le nombre Ni d'ions formés ne variait pas linéairement en fonction de l'intensité I de l'impulsion laser. Ainsi, en échelle logarithmique, on obtenait des droites Ni = f (I) dont la pente correspond le plus souvent au nombre de photons prévu par la relation de conservation de l'énergie. Cette observation constituait bien entendu un succès pour la théorie des perturbations qui met en évidence une telle dépendance de la probabilité de transition W (* *) , pour l'ionisation par N photons:

$$Ni \propto W = \alpha I^N$$

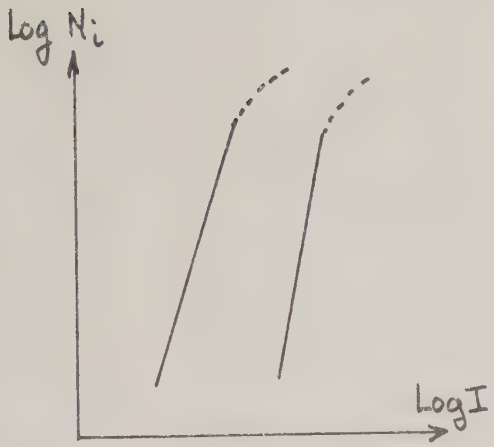



Fig. 5-12. Aspect caractéristique des courbes Log Ni=f(Log(I)).

Pourtant, en dehors de cette concordance qualitative, il est très difficile de prévoir théoriquement la valeur du coefficient de proportionnalité $\alpha$ . En effet ce coefficient dépend d'une part du système atomique considéré et d'autre part de paramètres caractérisant les conditions de l'expérience. Nous allons expliciter succinctement la nature de ces paramètres et montrer comment il est possible de tenir compte de leur influence.

---

(*) On travaille à basse pression pour éviter l'apparition éventuelle de phénomènes parasites tels que l'ionisation en cascade etc...

(* *) La probabilité de transition W (et donc le nombre d'ions formés Ni) varie proportionnellement à $I^N$; la section efficace $\sigma$ est obtenue en divisant W par le flux incident : $\sigma$ est donc proportionnel à $I^{N-1}$ (voir l'annexe B).

Tout d'abord, il convient de remarquer que l'intensité I, portée en abcisse du graphique, est l'intensité globale d'une impulsion laser, telle qu'elle est "intégrée" par le calorimètre.En fait, l'analyse montre que la distribution en intensité d'une impulsion révèle une structure spatio-temporelle complexe dont la forme exacte influe sur le nombre d'ions créés (111),(154),(155). On tente généralement d'estimer l'influence de cette structure en procédant de la manière suivante : on fait l'hypothèse qu'il est possible de factoriser les parties spatiale et temporelle de la distribution globale (154) ; ensuite on considère respectivement :

a) l'influence de la distribution spatiale de l'intensité. La forme de cette distribution conditionne la grandeur du volume d'interaction effectif $V_{eff}$ entre le rayonnement et le gaz. On peut l'estimer en projetant, à l'aide d'un microscope, une image agrandie de l'impulsion sur une plaque photo, puis en faisant une étude densitométrique de cette dernière. Un résultat typique, obtenu de cette manière,mène à une estimation de $V_{eff} \sim 10^{-7} cm^3$.

b) l'influence de la distribution temporelle de l'intensité : cette distribution n'est pas uniforme (ni même lisse) pendant la durée d'une impulsion. Sa structure, variable d'une impulsion à l'autre,peut être mise en évidence en réfléchissant une partie du rayonnement incident sur une photodiode rapide couplée à un oscilloscope.

Cependant,même en tenant compte de ces différents facteurs, il n'est pas toujours possible d'interpréter les résultats expérimentaux. Ceci provient notamment du fait que les calculs théoriques sont généralement effectués en supposant un rayonnement laser monomode. Or les expériences sont réalisées le plus souvent avec un faisceau laser multimode, ce qui influe directement sur les propriétés de cohérence du rayonnement. La prise en compte de ces effets devrait faire disparaître le désaccord constaté entre l'expérience et la théorie (156). On montre (8) notamment que si l'on tient compte des effets de corrélation la probabilité de transition relative à un processus à N photons est proportionnelle à une fonction de corrélation d'ordre N notée $\Phi$ (N). Sous certaines conditions, il est possible d'évaluer $\Phi$ (N). En particulier, lorsque le nombre de modes croit, $\Phi$ (N) tend asymptotiquement vers N ! et lorsque le laser fonctionne en régime monomode $\Phi$ (N)=1. Pour les cas intermédiaires nous renvoyons le lecteur à l'article de J.L. DEBETHUNE (8). Signalons enfin que parmi les différents facteurs mentionnés ci-dessus, le rôle de la cohérence est sans doute

le plus difficile à estimer. Le moyen le plus simple de s'en affranchir consiste à mettre au point des lasers monomodes suffisamment puissants : les expérimentateurs s'y emploient activement.

Après avoir explicité la nature des contributions expérimentales dont il faut tenir compte en vue d'estimer l'ordre de grandeur de $\alpha$ il reste à y insérer la section efficace atomique. La tâche du théoricien confronté au problème de l'évaluation de cette section efficace n'est pas aisée. Nous l'avons vu, des calculs précis n'ont été tentés que pour l'atome d'hydrogène. Pour les atomes plus complexes, on ne dispose que d'estimations plus ou moins approchées (voir le tableau 4.1).

En ce qui concerne la confrontation avec l'expérience, on en est donc réduit à se limiter à des comparaisons qualitatives se traduisant par des commentaires du type "on obtient un ordre de grandeur compatible avec les prévisions théoriques"...

En fait, on se rend compte que la seule comparaison convaincante à l'heure actuelle implique la réalisation d'une manipulation sur l'hydrogène atomique lui-même. Malgré les difficultés techniques rencontrées ceci a été réussi par M. LU VAN, G. MAINFRAY, C. MANUS et I. TUGOV (156) : ces auteurs ont étudié l'ionisation de l'hydrogène par absorption de 6 photons du second harmonique d'un laser au néodyme ($\lambda \simeq 5300$ Å). Pour des intensités $I \lesssim 2{,}4\ 10^{12}$ W/cm$^2$ l'accord entre la théorie (*) et l'expérience est bon, si l'on tient compte des facteurs passés en revue ci-dessus. Ce résultat confirme au passage la validité de la théorie des perturbations pour des intensités $I \lesssim 10^{12}$ W/cm$^2$. Pour les intensités $I > 10^{14}$ W/cm$^2$, nettement plus élevées, nous ne disposons pour l'instant d'aucune donnée expérimentale, mais il est probable que ce seuil sera bientôt franchi.

Notons que des puissances aussi élevées permettront sans doute d'observer aisément l'ionisation de l'atome d'hydrogène par 12 photons d'un laser au néodyme ($\lambda \simeq 10600$ Å). On peut même espérer l'observer en polarisation circulaire malgré la faible grandeur relative de la section efficace. Dans ce cas

---

(*) Les calculs théoriques correspondants ont été effectués par Y. GONTIER et M. TRAHIN (118) puis confirmés par nous même dans ce travail.

il n'existe alors qu'une voie ouverte et par suite une seule amplitude de transition à calculer (contre 924 en polarisation linéaire). Cette circonstance facilitera la comparaison entre théorie et expérience. Cela nous a semblé constituer une justification suffisante pour entreprendre le calcul de l'ionisation par 12 photons en polarisation circulaire. La technique utilisée est exactement semblable à celle que nous avons décrite précédemment. La section efficace pour $\lambda$ = 10600 Å, ainsi obtenue, a pour valeur :

$$\sigma'/I^{11} = 1.10^{-174} \text{ cm}^{24} / \text{watt}^{11} \quad \text{(V-6.1)}$$

A notre connaissance, c'est la première fois qu'un tel résultat est obtenu à l'aide d'un calcul "exact" dans le cadre de la théorie des perturbations. Si l'expérience correspondante est réalisée, on pourra vérifier ou infirmer les prédictions de cette théorie... En tout état de cause, cela permettra soit d'étendre soit de limiter son domaine présumé d'application...

Pourtant, après avoir ouvert ces perspectives prometteuses, il convient de signaler qu'elles ne sont ouvertes que dans le cadre de circonstances idéales pour ne pas dire "idylliques". Plus explicitement dans la pratique, les faits ne se prêtent pas toujours aux interprétations relativement sommaires données ci-dessus. Nous évoquerons ces difficultés dans le paragraphe suivant.

## V-7. EFFETS D'ORDRES SUPERIEURS

Avant d'interpréter les désaccords entre la théorie et l'expérience, auxquels nous avons fait allusion, il est nécessaire de rappeler sous quelles approximations les résultats théoriques sont généralement obtenus.

a) On travaille dans une représentation à "niveaux non déplacés" : on ne tient donc pas compte de l'effet du champ sur l'énergie des niveaux atomiques.

b) on n'évalue que le premier terme non nul de la série perturbative et l'on néglige les contributions d'ordres plus élevés.

Ainsi que nous l'avons signalé, cette description simplifiée ne permet pas toujours d'interpréter les résultats expérimentaux. En particulier, les droites Log W = f (Log I) ont fréquemment une pente $N_{exp} < N_{th}$ où $N_{th}$ est l'ordre de non-linéarité prévu par la relation de conservation de l'énergie (111) (152) (153). Par ailleurs, cette description est également insuffisante pour rendre compte des processus résonants.

Pour améliorer ce modèle, deux possibilités sont ouvertes :

1) ou l'on reste dans la représentation "à niveaux non déplacés" : on doit alors calculer les termes d'ordres supérieurs du développement. Si l'atome est illuminé par un rayonnement intense, on ne prend en considération que les corrections radiatives induites par des photons réels du champ. Cela conduit à insérer, dans le graphe original, des termes supplémentaires correspondant à des processus de diffusion vers l'avant de photons réels du champ.

2) ou l'on choisit de prendre en considération le couplage atome-champ et il est alors justifié de se limiter au calcul du premier terme non-nul du développement. Cela implique de tenir compte, notamment dans les états intermédiaires, des déplacements (light-shift) et élargissements induits par le champ électromagnétique. Pour l'instant ce problème n'a pas reçu de solution exacte, même dans le cas de l'atome d'hydrogène (*). Par contre, diverses méthodes approchées ont été proposées pour tenter de rendre compte des effets de ce couplage.

Nous mentionnerons brièvement les méthodes les plus connues qui ont été appliquées notamment à l'étude de la largeur naturelle des raies :

a) La méthode de Weisskopf et Wigner (voir la référence (157) p. 126) qui a été utilisée en particulier par M. SCULLY et W.E. LAMB (158).

---

(*) Des solutions exactes pour des potentiels très simplifiés (fonction $\delta$ à une dimension) peuvent être obtenues dans un champ électrique dipolaire polarisé circulairement (173).

b) La méthode perturbative de W. HEITLER (voir la référence (159) §. 16) adaptée à l'étude des transitions radiatives entre niveaux atomiques déplacés (9).

c) La méthode de F. LOW (13) dans laquelle les corrections radiatives sont insérées dans la fonction de Green (ou propagateur) de l'électron atomique. Les travaux de Y. GONTIER et M. TRAHIN (10) sont basés en partie sur ce formalisme.

Il est intéressant de remarquer que ces méthodes ont été mises au point afin de tenir compte de l'interaction de l'atome avec les photons virtuels du champ. Ceci a permis d'interpréter les données expérimentales sur des processus tels que la diffusion résonante etc...

La mise en évidence des processus multiphotoniques a posé le problème quelque peu différent des corrections radiatives induites par les photons réels d'un champ extérieur intense. En fait ces corrections ne prennent une grande importance relative et ne peuvent être mises en évidence expérimentalement que si l'on se place au voisinage d'une résonance. Cette constatation a suscité récemment de nombreuses études (10), (11), (160), (161) orientées vers l'interprétation des processus multiphotoniques résonants.

Un des résultats importants de ces travaux est que le déplacement des niveaux atomiques causé par le champ extérieur peut faire apparaître des résonances, non prévisibles a priori dans un modèle "à niveaux non déplacés". De plus, la prise en compte de ces corrections radiatives induites, a permis de montrer qu'au voisinage d'une résonance l'ordre de non linéarité varie très rapidement en fonction de la longueur d'onde(10).Ce fait a été confirmé expérimentalement (162), (163) : il permet d'expliquer, au moins qualitativement, la différence alors constatée entre $N_{exp}$ observé et $N_{th}$ prévu.

Une des caractéristiques communes de ces calculs, que l'on se place dans une représentation à niveaux déplacés ou non, est de nécessiter l'évaluation d'amplitudes associées aux processus de diffusion vers l'avant (10). Nous montrons ci-après l'utilité de l'emploi du formalisme de la fonction de Green coulombienne dans ces calculs (125).

Le "light shift" des niveaux atomiques

Le déplacement d'un niveau $|n\ell m\rangle$ par irradiation lumineuse (light-shift) est donné (164), à l'ordre le plus bas, par l'expression suivante (en unités atomiques) :

$$\Delta E_{n\ell m}(\omega) = \frac{1}{2}\left(\frac{I}{I_o}\right)\left[M_{n\ell m}(\omega) + M_{n\ell m}(-\omega)\right] \qquad \text{(V-7.1)}$$

où $\omega$ représente l'énergie des photons impliqués dans le processus de diffusion vers l'avant ; I est l'intensité du rayonnement incident et $I_o = 7{,}018\ 10^{16}$ Watts/cm$^2$ correspond à l'unité atomique d'intensité lumineuse ; $M_{n\ell m}(W)$ est l'élément de matrice du second ordre, qui s'écrit dans l'approximation dipolaire :

$$M_{n\ell m}(W) = \sum_j \sum_{\nu\lambda\mu} \frac{\langle n\ell m|\vec{\varepsilon}_j\cdot\vec{r}\,|\nu\lambda\mu\rangle\langle\nu\lambda\mu|\vec{\varepsilon}_j\cdot\vec{r}\,|n\ell m\rangle}{(E_n + W - E_\nu)} \qquad \text{(V-7.2)}$$

avec les notations habituelles.

Le calcul de la partie angulaire ne pose pas de problème particulier. Si l'axe de quantification $Oz$ est orienté parallèlement à la direction de propagation du rayonnement, on obtient, dans le cas d'un faisceau non polarisé :

$$M_{n\ell m}(W) = \frac{1}{2(2\ell+1)}\left\{\frac{(\ell+1)(\ell+2)+m^2}{2\ell+3}T_{n,\ell;\ell+1}(W) + \frac{\ell(\ell-1)+m^2}{2\ell-1}T_{n,\ell;\ell-1}(W)\right\} \qquad \text{(V-7.3)}$$

où les amplitudes réduites radiales $T_{n,\ell;\lambda}(W)$ ont pour expression

$$T_{n,\ell;\lambda}(W) = \langle n\ell|r\,G_\lambda(E_n+W)\,r|n\ell\rangle \qquad \text{(V-7.4)}$$

Dans l'équation (V-7.3), chacun des termes du membre de droite correspond à l'une des voies possibles $\ell \to \ell+1 \to \ell$ ; $\ell \to \ell-1 \to \ell$. On constate, par ailleurs, que le "light-shift" dépend du nombre quantique magnétique m du niveau impliqué. Ceci confirme l'analogie qui existe entre ce déplacement et l'effet Stark quadratique (20).

Nous avons calculé les amplitudes réduites $T_{n,\ell;\lambda}(W)$

en utilisant la représentation "sturmienne" de la fonction de Green coulombienne. Le formalisme est détaillé dans le chapitre IV : nous y renvoyons le lecteur. Tous calculs faits on obtient :

$$T_{n,\ell;\lambda}(W) = -\frac{2^{2\ell+2\lambda+4}(n+\ell)!\,x^{2\lambda+1}}{[(2\ell+1)!\,(2\lambda+1)!]^2(n-\ell-1)!\,n^{2\ell+4}}\sum_{n'=\lambda+1}^{\infty}\left(n'-\frac{1}{2}\right)^{-1}\frac{(n'+\lambda)!}{(n'-\lambda-1)!}\left[J\left(n,\ell,\frac{1}{n}\middle|n',\lambda,x\right)\right]^2 \qquad \text{(V-7.5)}$$

où $x = \sqrt{-2(E_n+W)}$ La fonction J est donnée par la formule générale (IV-6.11).

A partir de l'expression (V-7.5), il est aisé de calculer le "light-shift" d'un état $|n\ell m\rangle$ quelconque. A titre d'exemple nous avons évalué les déplacements des niveaux $|n,1,1\rangle$ de l'hydrogène, induits par le rayonnement d'un laser à $CO_2$ ($\lambda = 10{,}6\,\mu$).

Nous avons pu ainsi comparer nos résultats (125) avec les données expérimentales et théoriques de B. DUBREUIL et al. (165). Ces derniers avaient effectué le calcul de l'expression (V-7.2) en sommant terme à terme la contribution des états liés et en intégrant numériquement la contribution du continuum. Ainsi que nous l'avons vu dans le chapitre III, à l'occasion du calcul du logarithme de Bethe, la méthode est délicate et réclame beaucoup de précautions. Par comparaison, le formalisme de la représentation "sturmienne" de la fonction de Green est beaucoup plus facile à mettre en oeuvre...

Nous comparons, dans le tableau suivant, les résultats théoriques ainsi obtenus.

Il n'apparait de différences notables que pour les états très excités. Celles-ci peuvent s'expliquer par le fait que pour ces états, les amplitudes $T_{n,\ell;\lambda}(W)$ présentent une structure résonante dans le domaine de fréquences considéré. Ceci a pour conséquence de rendre délicate la comparaison

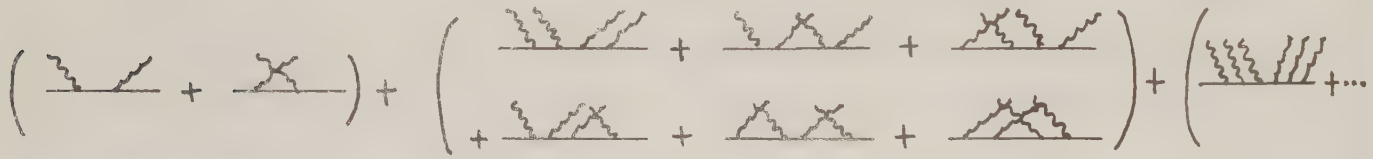
TABLEAU 5.2

| n | DUBREUIL-CHAPELLE (165) | CE TRAVAIL |
|---|---|---|
| 2 | - . 2920 (-3) | - . 2919 (-3) |
| 3 | - . 2217 (-2) | - . 2217 (-2) |
| 4 | - . 1140 (-1) | - . 1140 (-1) |
| 5 | - . 6509 (-1) | - . 6525 (-1) |
| 6 | . 2700 | . 2712 |
| 7 | . 9573 (-1) | . 9384 (-1) |
| 8 | - . 1920 | - . 1808 |
| 9 | . 2595 (-1) | . 3131 (-1) |
| 10 | . 2926 (-1) | . 6447 (-1) |

Valeurs en $cm^{-1}$ du "light-shift" des états $P$ : $|n, \ell = 1, m = 1\rangle$ de l'atome d'hydrogène irradié par le rayonnement d'un laser à $CO_2$ ($\lambda = 10{,}6\ \mu$) d'une puissance de 1 $MW/cm^2$.

entre calculs numériques(*). Signalons également que, pour ces états, la grossièreté du modèle choisi, négligeant la largeur naturelle des niveaux, enlève toute signification physique aux résultats numériques...

Il convient aussi de noter que les résultats précédents ont été obtenus à l'ordre le plus bas du développement perturbatif. Ceci est suffisant pour des intensités modérées du rayonnement laser. Ainsi P.F. LIAO et J.E. BJORKHOLM (166) ont pu vérifier expérimentalement la validité de cette description. Par contre, vers les hautes intensités, il serait sans doute nécessaire de tenir compte des termes d'ordres supérieurs, correspondant à des diffusions vers l'avant de 2, 3... photons.



Très récemment Y. GONTIER, N. RAHMAN et M. TRAHIN (167) ont pris en compte de manière approchée, la contribution de tels graphes à une section efficace d'ionisation multiphotonique. Ceci a permis d'interpréter, au moins qualitativement, l'évolution des sections efficaces vers les hautes intensités. Par la suite, nous pensons tenter d'adapter le formalisme mis au point dans ce travail à l'étude de ces phénomènes.

La prochaine mise au point de lasers de très grande puissance, suscite d'ores et déjà de nombreuses spéculations sur la description des phénomènes observables dans de telles conditions.

---

(*) En particulier, une petite différence dans les facteurs de conversion de l'énergie du photon, en unités atomiques, se traduit alors par de grandes variations du résultat global. Nous avons pu vérifier ce dernier point : il convient de préciser que nos calculs sont effectués pour l'atome d'hydrogène en utilisant la constante de Rydberg $R_H$ et non $R_\infty$.

## V - 8. VERS LES TRES HAUTES INTENSITES...

Il n'est pas possible d'abandonner le thème des processus multiphotoniques sans mentionner un courant très intéressant des recherches actuelles : la description des interactions rayonnement-matière aux très hautes intensités. Ces dernières années, on a pu assister à une floraison importante de modèles, prétendant s'affranchir de la théorie des perturbations, du moins sous sa forme présentée ici. Le point commun de ces spéculations repose sur une hypothèse simple : lorsque le champ électrique moyen $\mathcal{E}_0$ associé à l'onde incidente atteindra le même ordre de grandeur que l'unité atomique de champ électrique ($E_0 \sim 5.10^9$ V/cm soit $I \sim 10^{16}$ W/cm$^2$) il ne sera plus possible d'utiliser le développement perturbatif sous sa forme habituelle présentée dans ce travail.

Nous mentionnerons très succinctement les diverses théories qui ont été proposées.

### V - 8.A THEORIES REPOSANT SUR UNE TRANSFORMATION UNITAIRE

#### a) - Methode de translation d'impulsion

Cette théorie a été proposée par H.R. REISS (168) en 1970. De nombreux auteurs l'ont utilisée par la suite(*), mais sa validité a été sérieusement mise en doute par C. COHEN TANNOUDJI et al. (145) puis par A. DECOSTER (169). Ces auteurs ont montré en fait que la transformation unitaire proposée :

$$\Psi \text{ (représentation de Schrödinger)} = e^{ieA.r} \overline{\Psi} \text{ (Reiss)} \qquad \text{(V-8.1)}$$

n'apportait aucune information supplémentaire dans l'étude des processus multiphotoniques.

#### b) - Méthode de translation de position

Cette théorie a été proposée par W.C. HENNEBERGER (170) en 1968. On applique la transformation unitaire suivante :

$$\overline{\Psi} \text{ (Henneberger)} = e^{i\int_{-\infty}^{t} H_{int.}(\tau)\, d\tau} \Psi \text{ (Schrödinger)} \qquad \text{(V-8.2)}$$

---

* Voir notamment la bibliographie contenue dans la référence (169).

La transformée de l'équation de Schrödinger est formellement identique à l'originale à l'exception du potentiel atomique $V(\vec{r})$ dont l'argument subit une translation $V(\vec{r}) \rightarrow V(\vec{r} + \vec{\alpha}(t))$. Dans cette expression le paramètre $\vec{\alpha}(t)$ dépend du champ :

$$\vec{\alpha}(t) = \frac{e}{m\omega c} \vec{A}(t) \qquad \text{(V-8.3)}$$

Des estimations numériques ont été effectuées en ne tenant compte que de la partie indépendante du temps de $V(\vec{r} + \vec{\alpha}(t))$. Une des conséquences des résultats obtenus sous cette approximation, est que le potentiel d'ionisation atomique est fortement modifié en présence du champ intense. Ce fait expliquerait, selon l'auteur, les différences constatées entre les ordres de non linéarité expérimentaux $N_{exp}$ et théoriques $N_{th}$.

Neanmoins, on peut se demander quelle est la signification physique de certains des résultats obtenus dans cette approximation. En particulier on constate que le paramètre $\vec{\alpha}$ est inversement proportionnel à la fréquence $\omega$ du rayonnement incident. Ceci entrainerait que dans un champ intense le potentiel d'ionisation atomique $E_I$ tendrait vers 0 lorsque $\omega \rightarrow 0$. Il est probable que ce résultat non-physique soit une conséquence des approximations opérées dans la détermination du potentiel effectif $V(\vec{r} + \vec{\alpha}(t))$.

En guise de conclusion provisoire, relative à ce type de méthodes, on peut noter que les transformations unitaires proposées n'apportent pas de simplifications significatives des calculs. Pour obtenir des informations sur les effets à haute intensité on est amené à utiliser des procédures itératives qui correspondent formellement à un calcul perturbatif... Le deuxième type de théories proposées semble plus riche de promesses.

## V - 8.B. METHODES DANS LESQUELLES LE POTENTIEL ATOMIQUE EST CONSIDERE COMME UNE PERTURBATION

L'idée commune sous-jacente dans ces méthodes repose sur l'hypothèse suivante : dans un champ électromagnétique très intense ($I > I_o \sim 10^{16}$ W/cm$^2$ pour l'hydrogène), le potentiel atomique peut être considéré comme "petit" vis à vis de l'interaction de l'électron avec le champ.

Dans l'approximation dipolaire le hamiltonien total décrivant le système global peut s'écrire :

$$H = H_{cin} + H_{int} + V \qquad \text{où :} \qquad \text{(V-8.4)}$$

$$H_{cin} = \frac{p^2_{op.}}{2m} ; \qquad \text{(V-8.5)}$$

$$H_{int} = -\frac{e}{mc}\vec{p}.\vec{A} \qquad \text{et} \quad V \text{ est le potentiel atomique.} \qquad \text{(V-8.6)}$$

La fonction d'onde, associée au système, est solution de l'équation de Schrödinger :

$$\left(i\frac{\partial}{\partial t} - H\right)|\psi\rangle = 0 \qquad \text{(V-8.7)}$$

La fonction de Green complète associée à cette équation est solution de

$$\left(i\frac{\partial}{\partial t} - H\right) G = I \qquad \text{(V-8.8)}$$

Si l'on considère que V est "petit" par rapport aux autres composantes de H on est amené à introduire la fonction de Green "réduite" $G_o$ :

$$\left(i\frac{\partial}{\partial t} - H_{cin.} - H_{int}\right) G_o = I \qquad \text{(V-8.9)}$$

A partir de ce point, les analyses diffèrent selon que l'on s'intéresse

a) à l'évolution du système (électron plus champ) perturbé par le potentiel atomique V : méthode de S. GELTMAN et M.R. TEAGUE (171).

b) aux transitions, entre états propres de $H_{cin} + V$, induites par $H_{int}$, en négligeant V dans les états intermédiaires : méthode de M.H. MITTLEMAN (172).

Méthode de S. GELTMAN et M.R. TEAGUE (171)

Avant que le champ intense ne soit appliqué, le système "atomique" est représenté par une superposition cohérente d'ondes planes $|\varphi_i\rangle$ solutions de :

$$\left(i\frac{\partial}{\partial t} - H_{cin.}\right)|\varphi_i\rangle = 0 \qquad \text{(V-8.10)}$$

Après que le champ ait été branché, au temps t = - T, le système global est décrit par la fonction $|\Psi\rangle$ solution de l'équation (V -8.7). La fonction $|\Psi\rangle$ vérifie également l'équation intégrale (*) :

$$|\Psi\rangle = |\Phi\rangle + G_0 V |\Psi\rangle \qquad \text{(V-8.11)}$$

où $G_0$ est solution de l'équation (V-8.9)

et $|\Phi\rangle$ est solution de l'équation de Schrödinger réduite :

$$\left(i\frac{\partial}{\partial t} - H_{cin.} - H_{int.}\right)|\Phi\rangle = 0 \qquad \text{(V-8.12)}$$

assortie de la condition limite suivante $|\Phi\rangle = |\varphi_i\rangle$ si $t \leqslant -T$. L'équation intégrale est résolue par la technique itérative habituelle ; si l'on se limite au terme du premier ordre en V on a :

$$|\Psi\rangle^{(1)} = |\Phi\rangle + G_0 V |\Phi\rangle \qquad \text{(V-8.13)}$$

Pendant la durée de branchement du champ, l'évolution du système est décrite par cette fonction $|\Psi\rangle^{(1)}$.

L'amplitude de probabilité de transition vers un état final "atomique", représenté également par une superposition d'ondes planes $|\varphi_f\rangle$, est donc :

$$T_{f/i} = \langle \Phi_f | \Psi \rangle^{(1)} \qquad \text{(V-8.14)}$$

où $|\Phi_f\rangle$ est solution de l'équation (V-8.12) avec la condition à la limite $|\Phi_f\rangle = |\varphi_f\rangle$ si $t \gtrsim + T$.

La probabilité de transition est obtenue à partir de cette amplitude en supposant $T \to \infty$

$$W_{f/i} = \lim_{T \to \infty} \frac{1}{2T} |T_{f/i}|^2 \qquad \text{(V-8.15)}$$

L'ensemble de ces approximations conduit à des prévisions qualitatives exposées dans la référence (171). Notons que la méthode permet, en principe, de décrire un processus de transition entre deux états atomiques quelconques, qu'ils appartiennent au spectre discret ou continu. En ce sens, ce résultat représente une extension de la description voisine, proposée antérieurement par N.M. KROLL et K.M. WATSON (178).

---

(*) Cette équation est formellement identique à l'équation de Lippman-Schwinger.

Cette dernière méthode était adaptée au calcul d'amplitudes de transition entre deux états stationnaires de diffusion dans un potentiel V, en présence d'un champ intense.

Pour l'instant, aucune prévision quantitative n'a été effectuée à partir de l'une ou l'autre de ces théories. Signalons cependant que des calculs sont en cours dans le cadre d'un modèle simplifié de potentiel : $V = \delta(r)$ (173).

Méthode de M.H. MITTLEMAN (172)

Cette méthode diffère de la précédente essentiellement en ce que le potentiel perturbateur, responsable de la transition entre deux états atomiques, est ici $H_{int.}$ Dans le cas de l'ionisation, la matrice de transition d'un état initial atomique $|\varphi_0\rangle$ à un état atomique final $|\varphi_f\rangle$ est :

$$\langle \varphi_f | T | \varphi_0 \rangle = \langle \varphi_f | H_{int.} | \Psi \rangle \qquad \text{(V-8.16)}$$

Les fonction $|\varphi\rangle$ sont solutions de :

$$\left(i\frac{\partial}{\partial t} - H_{cin.} - V\right) |\varphi\rangle = 0 \qquad \text{(V-8.17)}$$

et(*) : $$|\Psi\rangle = |\varphi_0\rangle + G\, H_{int.} |\varphi_0\rangle \qquad \text{(V-8.18)}$$

Pour résoudre cette équation en présence d'un champ intense M.H. MITTLEMAN a supposé que l'on pouvait négliger le potentiel atomique dans l'équation de définition de G (V -8.8). Cela revient donc à remplacer G par la fonction de Green réduite $G_0$ (V-8.9).

$$|\Psi\rangle = |\varphi_0\rangle + G_0\, H_{int.} |\varphi_0\rangle \qquad \text{(V-8.19)}$$

Ensuite l'auteur obtient l'élement de matrice de transition multiphotonique en évaluant la contribution du second terme de l'expression ci-dessus. Signalons que, pour l'instant, aucune prévision quantitative n'a été proposée dans le cadre de cette théorie.

---

(*) Remarquer la différence avec la méthode précédente, basée sur l'équation de Lippman-Schwinger, qui s'écrirait dans le cas ci-dessus :

$$|\Psi\rangle = |\varphi_0\rangle + G'_0\, H_{int} |\Psi\rangle ;$$

où $G'_0$ serait alors la fonction de Green atomique.

Pour en terminer avec ce type de méthodes il est intéressant de remarquer l'analogie formelle qui existe entre les deux relations fondamentales pour chaque théorie :

(Geltman et al.) : $|\Psi\rangle = |\Phi\rangle + G_o V |\Phi\rangle$ (V-8.20)

(Mittleman) : $|\Psi\rangle = |\varphi_o\rangle + G_o H_{int} |\varphi_o\rangle$ (V-8.21)

Dans chaque cas, la fonction de Green réduite $G_o$ représente l'évolution du système électron libre plus champ. De plus, les fonctions d'ondes perturbées sont évaluées en négligeant l'influence de V au premier ordre dans les états intermédiaires. Cette dernière circonstance représente probablement la principale limitation de l'application de ces théories. Il sera sans doute nécessaire de pousser plus loin l'itération...

Avant de clore ce chapitre, nous devons mentionner les très récents travaux de Y. GONTIER et M. TRAHIN (167). Ces auteurs ont tenté de sommer exactement la série des perturbations ou tout au moins les termes correspondant à une certaine classe de diagrammes contribuant au processus considéré. Nous avons vérifié que le formalisme de la fonction de Green sturmienne s'appliquera sans doute au calcul de ces contributions. Nous espérons pouvoir collaborer par la suite avec ces auteurs.

Enfin, nous voudrions signaler que tous les travaux précédemment cités ne tenaient pas compte des propriétés statistiques du champ lui-même. Pourtant nous avons vu que dans le cas des impulsions laser multimodes, les effets de corrélation entre les divers modes devraient être pris en compte. Ceci a encore été confirmé expérimentalement très récemment (179). On peut s'attendre à ce que ces effets soient amplifiés aux très hautes intensités. Afin de faciliter la comparaison entre la théorie et l'expérience, il serait souhaitable d'utiliser un laser monomode. Cependant même dans ce cas "idéal", I. BIALYNICKI-BIRULA et Z. BIALYNICKA-BIRULA (180) ont pu montrer qu'en présence d'un champ intense, les corrections radiatives habituelles doivent être modifiées, et ceci même pour les corrections induites par un photon virtuel ! Il serait donc intéressant d'étudier l'influence éventuelle d'un champ extérieur

sur la valeur du déplacement de Lamb. Un tel effet sera peut être observable un jour, grâce aux spectroscopies nouvelles basées sur l'utilisation du laser...

# C O N C L U S I O N

A l'occasion de ce travail, nous pensons avoir démontré l'utilité de l'emploi de la fonction de Green coulombienne dans certains calculs de perturbation.

Pour en faire le bilan, nous distinguerons deux parties distinctes :

D'une part l'exploration des possibilités du formalisme de la fonction de Green coulombienne.

D'autre part l'étude, à l'aide de ce formalisme, de processus fondamentaux de la physique atomique.

En ce qui concerne la première partie, nous avons tenté de résumer nos principales conclusions sous la forme du "jeu" présenté dans le tableau suivant. Ce "jeu" pourra servir de guide sommaire à l'éventuel utilisateur de ce formalisme. Nous y avons fait figurer notamment les principaux avantages et limitations afférents à chaque type de représentation.

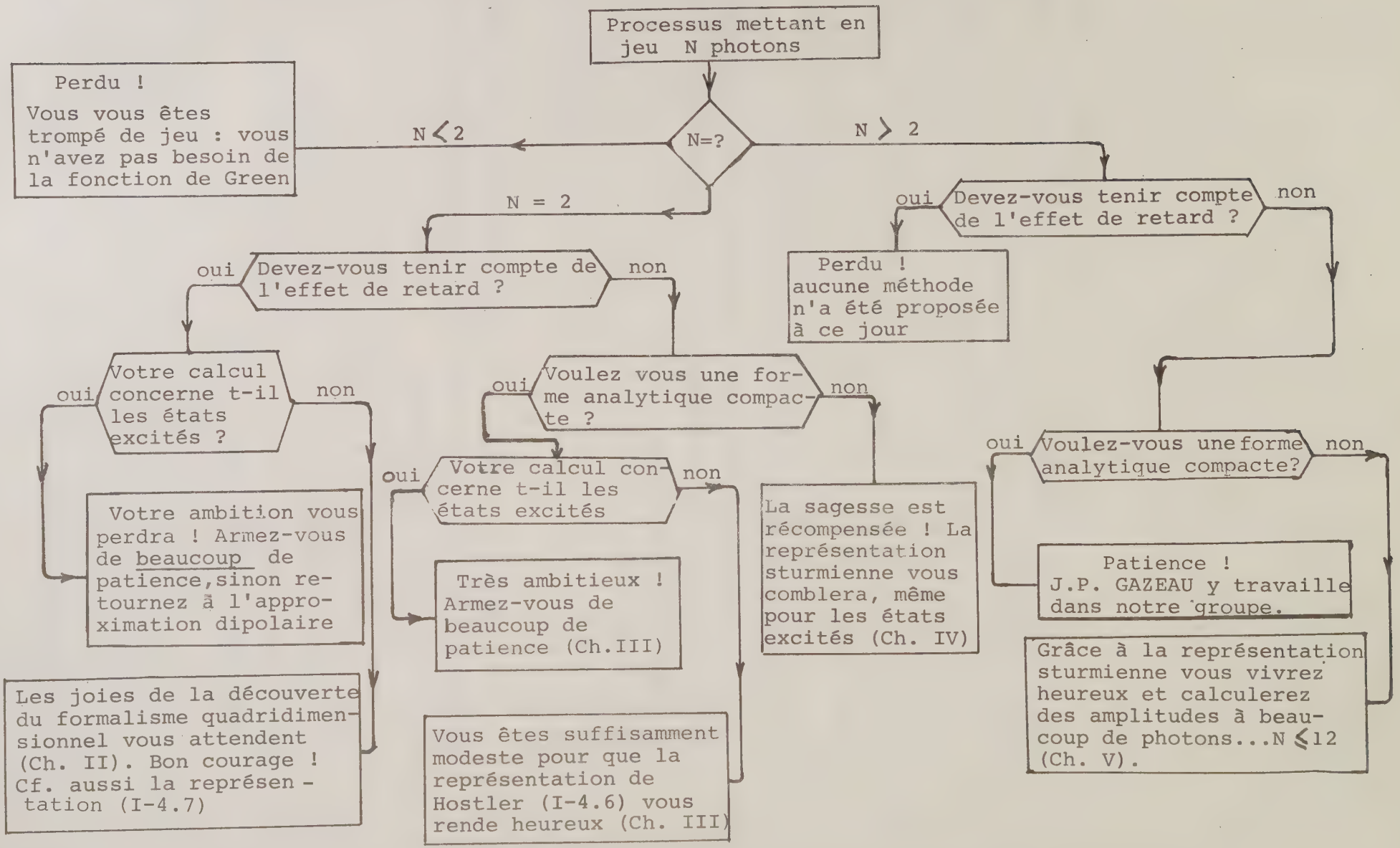
Quant à la seconde partie, elle concerne l'application du formalisme décrit ci-dessus à l'étude de processus radiatifs impliquant plusieurs photons.

Ainsi, nous avons donné des expressions analytiques exactes de diverses amplitudes du second ordre en tenant compte ou non de l'effet de retard. A partir d'expressions de ce type, nous avons obtenu des résultats numériques très précis sur le Logarithme de Bethe dans les états excités.

Ensuite, nous avons mené à bien le calcul "exact" de sections efficaces d'ionisation par $2 \leqslant N \leqslant 8$ photons. L'étude des processus multiphotoniques représente un thème de recherche en plein développement. Pour donner une idée des progrès accomplis en une décennie, il n'est pas inutile d'en rappeler

# LE JEU DE LA FONCTION DE GREEN

(A l'usage exclusif des amateurs de calculs "exacts" d'amplitudes de transitions multiphotoniques dans l'atomes d'hydrogène.)



la chronologie. La mise en évidence expérimentale de transitions multiphotoniques pour des fréquences optiques date de 1961. Dix ans plus tard, on a pu observer des processus d'ionisations impliquant jusqu'à 18 photons... A l'heure actuelle, ces processus ne sont plus seulement sujets d'études en eux-mêmes mais ils sont utilisés comme moyens d'études en spectroscopie atomique !(181), (175). Ces progrès remarquables expliquent l'intérêt croissant qui se manifeste pour ce sujet de recherche (173).

Notre travail s'insère dans les tentatives d'interprétations théoriques de ces phénomènes. Si l'on se limite à l'étude des processus non résonants, nous pouvons, en principe, calculer des termes d'un ordre arbitrairement élevé. En ce sens, ce travail nous a permis de pousser la théorie des perturbations dans ses derniers retranchements. Néanmoins, il reste à vérifier que dans cette hypothèse, les résultats obtenus ont encore une signification physique. En effet, pour observer des processus d'ordre très élevé, on serait amené à utiliser des sources d'une puissance telle que la validité de la description perturbative pourrait être mise en doute...

Une description satisfaisante de tels processus réclame l'obtention de représentations compactes de la fonction de Green associée au système couplé atome plus champ. L'adaptation et la modification du formalisme mis au point dans ce travail en vue de l'étude de ce problème fondamental constituera un thème de recherche intéressant. Nous espérons l'aborder prochainement...

# ANNEXE A

## EVALUATION DES SOMMES INFINIES DE LA THEORIE DES PERTURBATIONS PAR LA METHODE DE C. SCHWARTZ ET J.J. TIEMANN (17).

Comme nous le mentionnons dans le texte, le principe de la méthode est du à A. DALGARNO et J.T. LEWIS (15). Cependant ce sont C. SCHWARTZ et J.J. TIEMANN (17) qui l'ont appliquée au cas qui nous intéresse directement, c'est-à-dire lorsque le système perturbé est un système hydrogénoïde et le potentiel perturbateur proportionnel à r (ou p). Ils ont montré que le calcul se simplifie alors notablement. Nous décrivons ci- dessous leur méthode, en l'appliquant à un processus du second ordre.

Soit donc à calculer une amplitude de transition au second ordre entre deux états liés, transition induite par un potentiel perturbateur proportionnel à r. La partie radiale est de la forme générale suivante :

$$T^{(2)}_{\lambda,\ell'}(W) = \sum_{\nu=\lambda+1}^{\infty} \frac{\langle n',\ell'|r|\nu,\lambda\rangle\langle\nu,\lambda|r|n,\ell\rangle}{W - E_\nu} \qquad (A.1)$$

où l'on suppose que, compte tenu des règles de sélection habituelles, $\lambda = \ell \pm 1$. On introduit alors la fonction $\Psi_\lambda(r)$ telle que :

$$\Psi_\lambda(r) = \frac{1}{W - H_\lambda(r)}\, r\,|n,\ell\rangle = \sum_{\nu=\lambda+1}^{\infty} \frac{|\nu,\lambda\rangle\langle\nu,\lambda|r|n,\ell\rangle}{W - E_\nu} \qquad (A.2)$$

où $H_\lambda(r)$, partie radiale du hamiltonien atomique pour le moment angulaire $\lambda$, s'écrit en unités atomiques (20) :

$$H_\lambda(r) = -\frac{1}{2}\frac{d^2}{dr^2} - \frac{1}{r}\frac{d}{dr} - \frac{Z}{r} + \frac{\lambda(\lambda+1)}{2r^2} \qquad (A.3)$$

$\Psi_\lambda(r)$ est donc solution de l'équation différentielle inhomogène :

$$[W - H_\lambda(r)]\,\Psi_\lambda(r) = r\,R_{n,\ell}(r) \qquad (A.4)$$

où $R_{n,\ell}(r)$ est la fonction d'onde radiale associée à l'atome

hydrogénoïde dans l'état initial $|n,\ell\rangle$

On définit ensuite à partir de $\psi_\lambda(r)$, une nouvelle fonction $U_\lambda(r)$ telle que :

$$\psi_\lambda(r) = r^{-1} U_\lambda(r) \qquad (A.5)$$

Par substitution dans (A.4), on obtient la forme de l'équation différentielle vérifiée par $U_\lambda(r)$ :

$$\left[ W + \frac{1}{2}\frac{d^2}{dr^2} + \frac{Z}{r} - \frac{\lambda(\lambda+1)}{2r^2} \right] U_\lambda(r) = r^2 R_{n,\ell}(r) \qquad (A.6)$$

D'après les relations de définition (A.5) et (A.2) on vérifie que :

$$U_\lambda(r) = \sum_{\nu=\lambda+1}^{\infty} \frac{r|\nu,\lambda\rangle\langle\nu,\lambda|r|n,\ell\rangle}{W - E_\nu} \qquad (A.7)$$

et que le calcul de $T^{(2)}_{\lambda,\ell'}(W)$ se ramène à celui de l'intégrale :

$$T^{(2)}_{\lambda,\ell'}(W) = \int_0^\infty dr\, r^2 R_{n',\ell'}(r)\, U_\lambda(r) \qquad (A.8)$$

Or, compte tenu de la forme analytique des fonctions $R_{n',\ell'}(r)$, cette intégrale se décompose en une somme finie d'intégrales du type général :

$$I_\lambda(t,n') = \left[ \int_0^\infty dr\, r^t\, e^{-pr}\, U_\lambda(r) \right]_{p=\frac{2Z}{n'}} \qquad (A.9)$$

Cette circonstance a incité C. SCHWARTZ et J.J. TIEMANN à introduire la transformée de Laplace $S_\lambda(p)$ de $U_\lambda(r)$ :

$$S_\lambda(p) = \int_0^\infty dr\, e^{-pr}\, U_\lambda(r) \qquad (A.10)$$

en remarquant que

$$I_\lambda(t,n') = \left[ \left(-\frac{d}{dp}\right)^t S_\lambda(p) \right]_{p=\frac{2Z}{n'}} \qquad (A.11)$$

Il reste à calculer $S_\lambda(p)$ qui vérifie l'équation différentielle :

$$\left(W + \frac{p^2}{2}\right)\frac{d^2 S_\lambda(p)}{dp^2} + (2p - Z)\frac{dS_\lambda(p)}{dp} + \left(1 - \frac{\lambda(\lambda+1)}{2}\right) S_\lambda(p) = \int_0^\infty dr\, r^4 e^{-pr} R_{n,\ell}(r) \qquad (A.12)$$

Dans le cas particulier où $\lambda = 1$, cette équation se réduit à une équation inhomogène du premier ordre en $dS_1(p)/dp$ que l'on peut résoudre numériquement. W. ZERNIK et R.W. KLOPFENSTEIN (21) ont montré que lorsque $\lambda \neq 1$, on pouvait également se ramener à une équation du premier ordre en $d^\lambda S_\lambda(p)/dp^\lambda$, à savoir :

$$\left(W+\frac{p^2}{2}\right)\frac{d^{\lambda+1}S_\lambda(p)}{dp^{\lambda+1}} + \left[p(\lambda+1)-Z\right]\frac{d^\lambda S_\lambda(p)}{dp^\lambda} = (-1)^{\lambda+1}\int_0^\infty dr\, r^{\lambda+3}\, e^{-pr} R_{n,\ell}(r) \qquad \text{(A.13)}$$

Comme le second membre peut toujours être évalué analytiquement, le problème initial se ramène donc à la quadrature numérique d'une équation différentielle inhomogène du premier ordre.

Bien entendu la méthode est applicable aussi lorsque la perturbation est proportionnelle à une puissance de r (ou de p) différente de 1 (17).

. Ainsi que nous l'avons déjà signalé, C. SCHWARTZ et J.J. TIEMANN (17) ont mis au point cette méthodes en 1959 pour l'évaluation de la partie non relativiste du déplacement de Lamb (Logarithme de Bethe). De nombreux auteurs l'ont utilisée depuis. Nous mentionnerons les travaux de M.H. MITTLEMAN et F.A. WOLF (22) qui l'ont appliquée en 1962 au calcul de la diffusion élastique de photons par l'atome d'hydrogène dans l'état fondamental. En 1964, W. ZERNIK (23) l'a utilisée pour étudier le "quenching" d'atomes d'hydrogène métastables par des radiations optiques ou infra-rouge puis il a étendu ses calculs à la photoionisation par deux photons (24) (21).

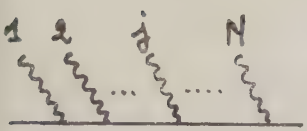
La généralisation aux processus mettant en jeu plus de deux photons a été effectuée dès 1967 par Y. GONTIER et M. TRAHIN (25) : pour un processus du nième ordre, il faut résoudre numériquement un système de N-1 équations différentielles inhomogènes du premier ordre.

l'impulsion $\vec{p}=\hbar\vec{k}$ du photoélectron. On suppose de plus qu'aucun photon d'un autre mode du champ n'a été annihilé ou créé au cours du processus.

La probabilité de transition entre ces deux états est donnée par la règle d'or de Fermi :

$$dW_{f/i} = \frac{2\pi}{\hbar} |\tau^{(N)}_{f/i}|^2 \, \varrho(E_f) \qquad (B.6)$$

où $\varrho(E_F)$ représente la densité d'états dans l'état final d'énergie $E_F = E_i$ et $\tau^{(N)}_{f/i}$ représente l'amplitude de transition (ou l'élément de matrice de transition) définie en théorie des collisions.




Dans le cadre de la théorie des perturbations dépendant du temps le premier terme non nul du développement perturbatif, correspondant au graphe ci-contre, a la forme développée suivante :

$$\tau^{(N)}_{f/i} = \left(-\frac{e}{mc}\right)^N \sum_{\nu_{N-1}} \cdots \sum_{\nu_j} \cdots \sum_{\nu_1} \langle f|\vec{p}.\vec{A}|\frac{\nu_{N-1}\rangle\langle\nu_{N-1}|}{E_i - E_{\nu_{N-1}}} \vec{p}.\vec{A} \cdots \frac{|\nu_j\rangle\langle\nu_j|}{E_i - E_{\nu_j}} \cdots \vec{p}.\vec{A} \frac{|\nu_1\rangle\langle\nu_1|}{E_i - E_1} \vec{p}.\vec{A}|i\rangle$$

où

$$|\nu_j\rangle = |n_j\rangle \otimes |\mathcal{N}_j\rangle \; ; \; E_{\nu_j} = E_{n_j} + \mathcal{N}_j \hbar\omega, \qquad (B.7)$$

et l'indice $n_j$ attaché à un état atomique symbolise la triade $(n_j, \ell_j, m_j)$. Les sommes apparaissant dans cette expression sont étendues à l'ensemble des spectres respectifs du système atomique et du champ électromagnétique.

On vérifie que dans l'approximation utilisée, seule la composante du potentiel vecteur $\vec{A}$ contenant l'opérateur d'annihilation pour le mode considéré, apportera une contribution non nulle à l'amplitude de transition. La raison en est que le processus d'absorption des N photons est décrit à l'ordre le plus bas, et que, dans ces conditions, il n'existe qu'un seul chemin pour atteindre l'état final.

En explicitant l'expression du potentiel vecteur on a par conséquent, dans l'approximation dipolaire :

$$\vec{p}.\vec{A}|i\rangle = \vec{p}.\vec{A}|n\ell m\rangle \otimes |\mathcal{N}\rangle = c\sqrt{\frac{2\pi\mathcal{N}\hbar}{\omega V}} \; \vec{p}.\vec{\varepsilon} \; |n\ell m\rangle \otimes |\mathcal{N}-1\rangle \qquad (B.8)$$

où l'on a utilisé le système d'unité de Gauss C.G.S. et où V représente le volume de normalisation. Compte tenu des relations

# ANNEXE B

## EXPRESSION EN UNITES ATOMIQUES DE LA SECTION EFFICACE D'IONISATION MULTIPHOTONIQUE.

### B-1. Expression de la section efficace

Dans cet exposé nous nous sommes limité à l'étude du processus d'ionisation au cours duquel entrent en interaction :

un champ électromagnétique monomode quantifié d'énergie $\hbar\omega$, de nombre d'occupation $\mathcal{N}$ et de vecteur polarisation $\vec{\varepsilon}$ et un atome hydrogénoïde dans l'état $|n, \ell, m\rangle$.

L'interaction entre ces deux systèmes, est décrite par le hamiltonien d'interactions (*) :

$$H_{int} = -\left(\frac{e}{mc}\right)\vec{p}.\vec{A} \qquad (B.1)$$

où $\vec{p}$ représente l'impulsion de l'électron atomique et $\vec{A}$ le potentiel vecteur du champ électromagnétique.

Au cours du processus d'ionisation à N photons considéré, le système global constitué de la superposition des deux systèmes non couplés (champ et atome) passe de l'état initial décrit conventionnellement par le ket :

$$|i\rangle = |n\ell m\rangle \otimes |\mathcal{N}\rangle , \qquad (B.2)$$

d'énergie : $E_i = E_n + \mathcal{N}\hbar\omega$ , (B.3)

à l'état final :

$$|f\rangle = |\vec{k}\rangle \otimes |\mathcal{N}-N\rangle , \qquad (B.4)$$

d'énergie : $E_f = E_{\vec{k}} + (\mathcal{N}-N)\hbar\omega$ ; (B.5)

dans lequel le nombre d'occupation du mode considéré est maintenant $(\mathcal{N}-N)$ et l'atome est dans l'état du continuum caractérisé par

---

(*) Nous ne tenons pas compte du terme en $A^2$ pour les raisons exposées dans le § (I-1.).

d'orthonormalisation vérifiées par les vecteurs d'état du champ électromagnétique : $\langle \mathcal{N}_i | \mathcal{N}_j \rangle = \delta_{\mathcal{N}_i, \mathcal{N}_j}$ , (B.9)

il vient :

$$\sum_{\nu_1} \frac{|\nu_1\rangle\langle\nu_1|}{E_i - E_{\nu_1}} \vec{p}.\vec{A} \; |i\rangle = c\sqrt{\frac{2\pi\mathcal{N}\hbar}{\omega V}} \, |\mathcal{N}-1\rangle \otimes \sum_{n_1} \frac{|n_1\rangle\langle n_1|}{E_n + \hbar\omega - E_{n_1}} \vec{p}.\vec{\varepsilon} \, |n\ell m\rangle \qquad \text{(B.10)}$$

Opérant de proche en proche on obtient finalement :

$$\tau_{f/i}^{(N)} = \left[-\frac{e}{m}\sqrt{\frac{2\pi\hbar}{\omega V}}\right]^N \left[\prod_{q=0}^{N-1} (\mathcal{N}-q)\right]^{1/2} \sum_{n_{N-1}} \cdots \sum_{n_1} \langle \vec{k} | \vec{p}.\vec{\varepsilon} \frac{|n_{N-1}\rangle\langle n_{N-1}|}{E_n + (N-1)\hbar\omega - E_{n_{N-1}}} \cdots \frac{|n_1\rangle\langle n_1|}{E_n + \hbar\omega - E_{n_1}} \vec{p}.\vec{\varepsilon} \, |n\ell m\rangle \qquad \text{(B.11)}$$

Passant de l'opérateur d'interaction $\vec{p}.\vec{\varepsilon}$ à l'opérateur d'interaction dipolaire $\vec{r}.\vec{\varepsilon}$ (voir le § IV-1) et en supposant $\mathcal{N} \gg N$ , ce qui est toujours vérifié, on obtient :

$$\tau_{f/i}^{(N)} = \left[-\frac{e}{m}\sqrt{\frac{2\pi\mathcal{N}\hbar}{\omega V}}\right]^N \left[\frac{m}{i}\omega\right]^N \mathcal{M}_{f/i}^{(N)} = \left[ie\sqrt{\frac{2\pi\mathcal{N}\hbar\omega}{V}}\right]^N \mathcal{M}_{f/i}^{(N)} \qquad \text{(B.12)}$$

où l'élément de matrice réduit $\mathcal{M}_{f/i}^{(N)}$ a la forme suivante :

$$\mathcal{M}_{f/i}^{(N)} = \sum_{n_{N-1}} \cdots \sum_{n_1} \langle \vec{k} | \vec{r}.\vec{\varepsilon} \frac{|n_{N-1}\rangle\langle n_{N-1}|}{E_n + (N-1)\hbar\omega - E_{n_{N-1}}} \vec{r}.\vec{\varepsilon} \cdots \frac{|n_1\rangle\langle n_1|}{E_n + \hbar\omega - E_{n_1}} \vec{r}.\vec{\varepsilon} \, |n\ell m\rangle \qquad \text{(B.13)}$$

Revenant à la probabilité de transition elle s'écrit :

$$dW_{f/i} = \frac{2\pi}{\hbar}\left[\frac{2\pi e^2 \mathcal{N}\hbar\omega}{V}\right]^N |\mathcal{M}_{f/i}^{(N)}|^2 \varrho(E_f) \qquad \text{(B.14)}$$

Il reste encore à expliciter la densité d'états dans l'état final $\varrho(E_f)$. Pour cela on peut remarquer que la connaissance de l'état du photoélectron suffit pour caractériser complètement l'état final du système. Le problème est donc ramené à celui de la recherche de la densité d'états $\varrho(E_k)$ d'un électron du continuum d'énergie comprise entre $E_k$ et $E_k + dE_k$ et se propageant dans une direction, située dans l'élément d'angle solide $d\Omega(\hat{k})$ : le nombre d'états ayant ces caractéristiques est donné par $\varrho(E_k)\, dE_k\, d\Omega(\hat{k})$. Pour expliciter $\varrho(E_k)$ il est plus

facile[x] de passer dans l'espace des impulsions $\hbar\vec{k}$ ( avec : $E_k = (\hbar k)^2 / 2m$). Le nombre d'états ayant les caractéristiques ci-dessus est alors :

$$\varrho(E_k)\, dE_k\, d\Omega(\hat{k}) = \varrho(k)\, d\vec{k} = \varrho(k)\, k^2\, dk\, d\Omega(\hat{k}) \qquad (B.15)$$

$\varrho(k)$ est obtenue à partir des propriétés des vecteurs d'états d'un électron (décrit asymptotiquement par une "onde plane") qui vérifient les relations d'orthonormalisation et de fermeture suivantes :

$$\langle \vec{k} | \vec{k}' \rangle = (2\pi)^3 \delta(\vec{k} - \vec{k}') \qquad (B.16)$$

et

$$\left(\frac{1}{2\pi}\right)^3 \int d\vec{k}\, |\vec{k}\rangle\langle\vec{k}| = 1 \qquad (B.17)$$

Ces dernières formules montrent que dans l'espace des $\vec{k}$ la densité d'états est constante et égale à $(2\pi)^{-3}$.

$$\varrho(E_k)\, dE_k\, d\Omega(\hat{k}) = (2\pi)^{-3} k^2\, dk\, d\Omega(\hat{k}) \qquad (B.18)$$

on obtient finalement :

$$\varrho(E_k) = m\hbar k\, (2\pi\hbar)^{-3} \qquad (B.19)$$

La section efficace, différentielle $\frac{d\sigma}{d\Omega(\hat{k})}$ relative à l'émission de photoélectrons d'énergie $E_k$ dans l'élément d'angle solide $d\Omega(\hat{k})$ est obtenue en divisant la probabilité Eq. (B.14) par le flux F de photons incidents ( $F = \frac{\mathcal{N}_c}{V}$) :

$$\frac{d\sigma_{fi}}{d\Omega(\hat{k})} = \frac{\alpha}{2\pi}\left(\frac{m}{\hbar^2}\right) k\, \hbar\omega \left[\frac{2\pi e^2 \mathcal{N} \hbar\omega}{V}\right]^{N-1} |\mathcal{M}_{fi}^{(N)}|^2 \qquad (B.20)$$

ou encore, en introduisant l'intensité I du faisceau lumineux monochromatique incident ($I = F\hbar\omega = \frac{\mathcal{N}_c}{V}\hbar\omega$) :

$$\frac{d\sigma_{fi}}{d\Omega(\hat{k})} = \frac{\alpha}{2\pi}\left(\frac{m}{\hbar^2}\right) k\, \hbar\omega \left[\frac{2\pi e^2}{c} I\right]^{N-1} |\mathcal{M}_{fi}^{(N)}|^2 \qquad (B.21)$$

---

(x) Voir réf. 3 Tome II § XVII-5

Il reste à exprimer cette relation dans le système d'unités choisi à savoir le système d'unités atomiques (ou système de Hartree) qui est largement utilisé en physique atomique. Nous donnons ci-après quelques renseignements sur la démarche à suivre.

B-2. Passage en unités atomiques

Ce paragraphe a pour objet d'expliciter certains aspects propres à ce système d'unités et qui n'apparaissent pas au premier abord dans la "bible" sur ce sujet, à savoir l'introduction du livre de H.A. BETHE et E.E. SALPETER (20). Nous y renvoyons le lecteur pour les définitions de base et une présentation générale : il nous suffira pour l'instant de rappeler que dans ce système on pose: $m = 1$ ; $e = 1$ ; $\hbar = 1$.

Notre but étant d'évaluer la section efficace $d\sigma/d\Omega$ il convient tout d'abord de rechercher l'équation aux dimensions de l'élément de matrice $\mathcal{M}^{(N)}_{f/i}$ . On est donc amené à donner successivement les dimensions des grandeurs suivantes :

1) fonction d'onde d'un état lié :

Les dimensions sont obtenues par exemple à l'aide de la relation de normalisation :

$$\langle n | n \rangle = \int d^3r \, |R_n(r)|^2 = 1 \qquad \text{(B.22)}$$

qui entraine que $R_n$ a les dimensions $L^{-3/2}$

2) fonction d'onde d'un état du continuum:

Ses dimensions dépendent du type de normalisation choisi. Si on la normalise par rapport à une fonction $\delta$ suivant l'échelle des vecteurs $\vec{k}$, on a :

$$\langle \vec{k} | \vec{k}' \rangle = \int d^3r \, R^*_{\vec{k}}(r) \, R_{\vec{k}'}(r) = (2\pi)^3 \delta(\vec{k} - \vec{k}') \qquad \text{(B.23)}$$

Or $\delta(\vec{k})$ a les dimensions de l'inverse d'un volume dans l'espace des vecteurs d'onde car $\int d^3\vec{k} \, \delta(\vec{k}) = 1$

Un nombre d'onde ayant les dimensions de l'inverse d'une longueur ceci entraine respectivement que $\delta(\vec{k})$ a les dimensions $L^3$ et que $R_k$ est sans dimensions.

Ces résultats ont pour conséquence que, pour les éléments de matrices dont nous aurons besoin :

- $\langle n' | r | n \rangle$ a les dimensions d'une longueur L. Cet élément de matrice est donc, en unités atomiques, un multiple de $a_o = \hbar^2/(me^2)$ = rayon de la première orbite de Bohr.

- $\langle k | r | n \rangle$ a les dimensions $(L)^{5/2}$, c'est donc un multiple de $(a_o)^{5/2} = (\hbar^2/me^2)^{5/2}$.

- Quant au dénominateur de $\mathcal{M}^{(N)}_{f/i}$, il contient un produit de (N-1) facteurs ayant les dimensions d'une énergie. Chacun de ces facteurs est un multiple de $W_o = \left(\frac{me^4}{\hbar^2}\right)$ = 2 fois le potentiel d'ionisation de l'atome H.

L'amplitude de transition d'ordre N :

$\mathcal{M}^{(N)}_{f/i}$ a donc les dimensions $\frac{(L)^{N+3/2}}{(\text{Energie})^{N-1}}$ et s'exprime unités atomiques :

$$\mathcal{M}^{(N)}_{f/i} = \left(\frac{\hbar^2}{me^2}\right)^{5/2} \left(\frac{\hbar^4}{m^2e^6}\right)^{N-1} \left[\mathcal{M}^{(N)}_{f/i}\right]_{\text{sans dimensions}} \qquad (B.24)$$

Revenant à l'expression de $(d\sigma/d\Omega(\hat{k}))$, il reste à exprimer en unités atomiques le nombre d'onde k du photoélectron, l'énergie $\omega$ des photons et l'intensité lumineuse I du rayonnement incident. Nous explicitons le cas de ce dernier paramètre.

L'intensité du champ associé à une onde électromagnétique est $I = \frac{c}{4\pi}|E|^2$ dans le système de Gauss (u.e.s. CGS). Or l'unité atomique d'intensité du champ électrique est $\frac{e}{a_o^2} = \frac{m^2e^5}{\hbar^4}$. On en déduit donc que l'unité atomique d'intensité lumineuse est :

$$I_o = \frac{c}{4\pi} \frac{m^4e^{10}}{\hbar^8} \qquad (B.25)$$

soit en unités plus usuelles :

$$I_o = 7{,}019 \quad 10^{16} \text{ Watt/cm}^2. \qquad (B.26)$$

A partir de ces données on obtient l'expression finale de la section efficace différentielle :

$$\frac{d\sigma_{f/i}}{d\Omega(k)} = \frac{\alpha}{2\pi} a_o^2 k\omega \left[\frac{I}{2I_o}\right]^{N-1} \left|\mathcal{M}^{(N)}_{f/i}\right|^2 \qquad (B.27)$$

Sous cette forme elle a les dimensions d'une surface et s'exprime par exemple en $cm^2$. Cependant il est d'usage (certes récent !...) de la rapporter à l'intensité du faisceau incident, élevée à la puissance N-1 :

$$\frac{1}{I^{N-1}} \frac{d\sigma}{d\Omega(k)} \left(cm.^{2N}/Watt^{N-1}\right) = \frac{\alpha}{2\pi} a_0^2 k \omega \left[14{,}038 \times 10^{16}\right]^{1-N} \left| \mathcal{M}^{(N)}_{f/i} \right|^2 \qquad \text{(B.28)}$$

où $a_o = 5{,}2917\ 10^{-9}$ cm. (B.29)

et où l'élément de matrice $\mathcal{M}^{(N)}_{f/i}$ est sans dimension.

# ANNEXE C

## PROCESSUS MULTIPHOTONIQUES :

### CALCUL DU NOMBRE DE CHEMINS MENANT A UN ETAT FINAL DE MOMENT ANGULAIRE DETERMINE.

Nous montrons ci-après comment il est possible de prévoir le nombre de chemins ouverts menant à un état final donné. La connaissance de ce nombre, variant selon l'état de polarisation du rayonnement incident, permet de mieux apprécier l'évolution de l'effet de polarisation lorsque N croît.

Soient donc $\ell$ le moment angulaire de l'état atomique initial, N le nombre de photons absorbés et L le moment angulaire caractérisant le système atomique dans l'état final. Compte tenu de la règle de sélection $\Delta\ell = \pm 1$, l'ensemble des chemins accessibles peut être représenté sur un graphe ayant la forme caractéristique d'un "arbre".

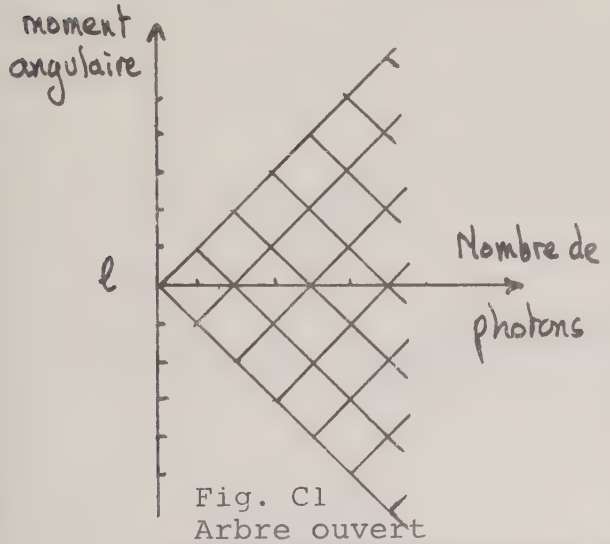


Fig. C1
Arbre ouvert

Le cas le plus simple $\ell \geq N$ est figuré dans le schéma ci-contre : l'arbre est alors "ouvert" et le nombre de chemins menant à un état donné ne dépend pas de la polarisation.

Soit $\nu_K(\ell \to \lambda)$ le nombre de chemins menant de l'état initial de moment angulaire $\ell$ à l'état final de moment angulaire $\lambda$, après l'absorption de K photons. Le graphique permet de mettre en évidence la propriété suivante du nombre $\nu_K$ :

$$\nu_K(\ell \to \lambda) = 0 \quad \text{si} \quad \lambda \neq \ell + K - 2j \; ; \; (j = 0, 1, \ldots K) \qquad (C.1)$$

Nous poserons conventionnellement :

$$\nu_0(\ell \to \lambda) = \delta_{\ell,\lambda} \qquad (C.2)$$

pour attribuer un poids unité au noeud situé à l'origine de l'arbre.

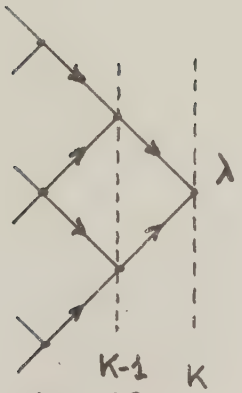



Fig. C2
Nombre de voies menant à un état $\lambda$.

De plus, les nombres $\nu_K$ vérifient la relation de recurrence fondamentale suivante :

$$\nu_K(\ell \to \lambda) = \nu_{K-1}(\ell \to \lambda-1) + \nu_{K-1}(\ell \to \lambda+1) \quad (C.3)$$

Pour calculer $\nu_N(\ell \to L)$ on applique cette relation de proche en proche :

$$\nu_N(\ell \to L) = \nu_{N-1}(\ell \to L-1) + \nu_{N-1}(\ell \to L+1) \quad (C.4)$$

$$\nu_N(\ell \to L) = \nu_{N-2}(\ell \to L-2) + 2\nu_{N-2}(\ell \to L) + \nu_{N-2}(\ell \to L+2)$$

$$\vdots \quad (C.5)$$

$$\nu_N(\ell \to L) = \sum_{k=0}^{P \le N} \binom{P}{k} \nu_{N-P}(\ell \to L-P+2k) \quad (C.6)$$

où $\binom{P}{k} = \frac{P!}{k!(P-k)!}$ est un coefficient du binôme.

Pour P = N et compte tenu de (C.2), on obtient le résultat :

$$\nu_N(\ell \to L) = \binom{N}{\frac{N+\ell-L}{2}} \quad (C.7)$$

qu'il est plus commode d'écrire :

$$\nu_N(\ell \to \ell+N-2j) = \binom{N}{j} \; ; \; 0 \le j \le N \quad (C.8)$$

Le nombre total de voies ouvertes $\mathcal{N}_\ell(N)$ peut être aisément obtenu à partir de ce résultat :

$$\mathcal{N}_\ell(N) = \sum_{j=0}^{N} \nu_N(\ell \to \ell+N-2j) \quad (C.9)$$

$$\mathcal{N}_\ell(N) = \sum_{j=0}^{N} \binom{N}{j} = 2^N \quad (C.10)$$

Ces relations simples ne sont valables en toute généralité que si $\ell \geqslant N$, ce qui représente une condition très restrictive lorsque N devient grand.

Dans le cas le plus fréquent où l'on s'intéresse à un état caractérisé par un $\ell < N$, le graphe correspondant prend

l'aspect caractéristique d'un arbre dissymétrique, coupé par la droite $\ell = 0$. Le nombre de voies accessibles dépend alors de l'état de polarisation de la lumière ce qui nous amène à distinguer deux possibilités.

a) Polarisation linéaire

Le nombre de chemins ouverts, menant à un état final $L = \ell + N-2j$ où :

$$j = 0, 1, 2 \ldots \begin{cases} \frac{\ell+N}{2}, \text{ si } \ell+N \text{ pair} \\ \frac{\ell+N-1}{2}, \text{ si } \ell+N \text{ impair} \end{cases} \quad (C.11)$$

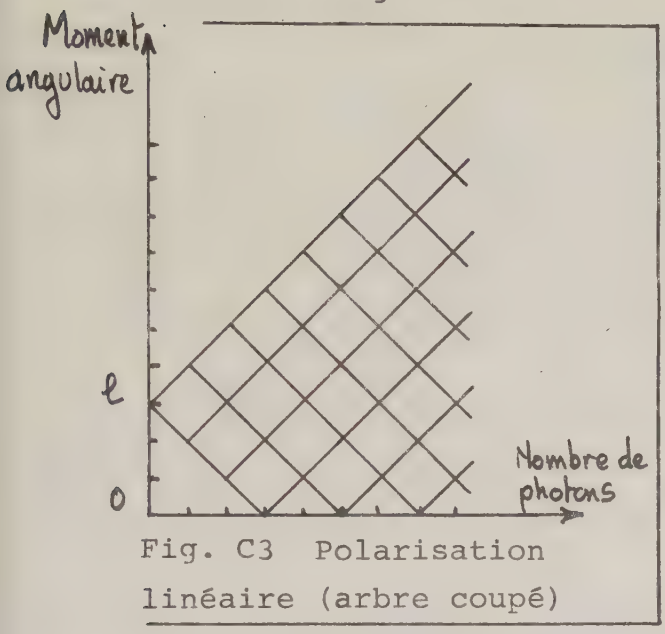


Fig. C3 Polarisation linéaire (arbre coupé)

est donné par la formule générale suivante :

$$\nu_N(\ell \to \ell+N-2j) = \binom{N}{j} - \binom{N}{j-\ell-1} \quad (C.12)$$

dans laquelle les paramètres ont la même signification que ci-dessus et où le second terme est nul lorsque $j \leq \ell$.

La validité de cette relation est aisément démontrée en s'appuyant sur un raisonnement par récurrence. On vérifie qu'elle est vraie pour N = 1, N = 2... puis, l'admettant pour N, on prouve qu'elle est vraie pour N + 1 :

$$\nu_{N+1}(\ell \to \ell+N+1-2j) = \binom{N+1}{j} - \binom{N+1}{j-\ell-1} \quad (C.13)$$

En effet : $\nu_{N+1}(\ell \to \ell+N+1-2j) = \nu_N(\ell \to \ell+N-2j) + \nu_N(\ell \to \ell+N+2-2j)$

$$= \binom{N}{j} - \binom{N}{j-\ell-1} + \binom{N}{j-1} - \binom{N}{j-\ell-2} \quad (C.14)$$

et utilisant la relation connue entre coefficients du binôme $\binom{n+1}{k} = \binom{n}{k} + \binom{n}{k-1}$ on retrouve le résultat cherché (C-12)

Le nombre total de voies ouvertes $\mathcal{N}_\ell(N)$ peut être obtenu à partir des résultats précédents en utilisant les

propriétés connues des coefficients du binôme. Ainsi, on montre que :

$$\mathcal{N}_\ell(N) = \sum \mathcal{V}_N(\ell \to \ell+N-2j) = \sum_{i=0}^{\ell} \binom{N}{\left[\frac{N-\ell}{2}\right]+i} \quad \text{(C.15)}$$

où $\left[\frac{N-\ell}{2}\right]$ représente le premier entier $\leq \frac{N-\ell}{2}$.

b) - Polarisation circulaire

Les résultats correspondants en polarisation circulaire se déduisent aisément des formules précédentes. Par exemple la la formule (C.12) n'est applicable qu'assortie de la condition supplémentaire $j \leq \ell$ mise en évidence sur le graphe ci-contre :

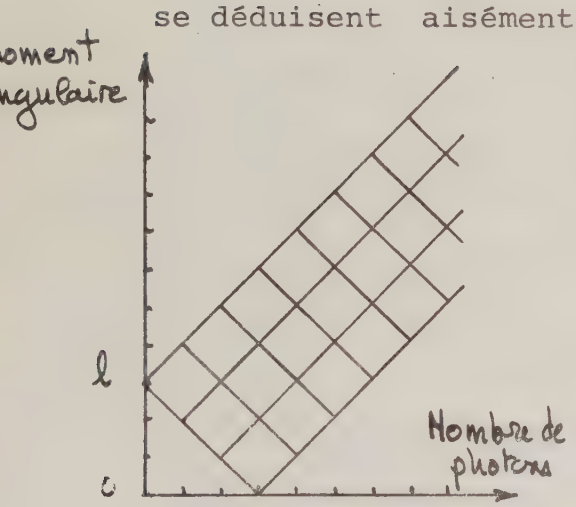



Fig. C4 Polarisation circulaire. Les états finals $L < N-\ell$ ne sont pas accessibles en raison de la règle de sélection $\Delta m = +1\ (-1)$.

$$\mathcal{V}'_N(\ell \to N+\ell-2j) = \binom{N}{j} \; ; \; j \leq \ell \quad \text{(C.16)}$$

et d'après (C.9).

$$\mathcal{N}_\ell(N) = \sum_{j=0}^{\ell} \binom{N}{j} \quad \text{(C.17)}$$

# ANNEXE D

## SUR DES REGLES DE SOMMES VERIFIEES PAR LES SYMBOLES 3-j

Les règles de somme (V-1.1) et (V-1.2) signalées dans le chapitre V ont été obtenues incidemment au cours de la mise au point du calcul de la partie angulaire des sections efficaces multiphotoniques. Nous montrons ci-après comment les retrouver aisément.

Par analogie avec le calcul des sections efficaces d'ionisation multiphotonique nous définissons une "amplitude de transition" du nième ordre(*).

$$A^{(N)}_{f/i} = \sum_{\lambda_{N-1},\mu_{N-1}} \cdots \sum_{\lambda_1,\mu_1} \langle f|\vec{\varepsilon}.\hat{r}|\lambda_{N-1},\mu_{N-1}\rangle\langle\lambda_{N-1},\mu_{N-1}|\cdots|\lambda_1\mu_1\rangle\langle\lambda_1\mu_1|\vec{\varepsilon}.\hat{r}|i\rangle \quad (D.1)$$

où :

$$|i\rangle = |\ell,m\rangle = Y_{\ell m}(\theta,\varphi) \quad (D.2)$$

$$|f\rangle = \sum_{L,M} Y_{L,M}(\theta,\varphi)\, Y^{*}_{L,M}(\alpha,\beta) \quad (D.3)$$

$$|\lambda,\mu\rangle = Y_{\lambda,\mu}(\theta,\varphi) \quad (D.4)$$

$\hat{r}$ est le vecteur unitaire $\vec{r}/r$ et $\vec{\varepsilon}$ définit l'état de polarisation du rayonnement .

En utilisant la relation de fermeture vérifiée sur l'ensemble complet des fonctions $Y_{\lambda,\mu}(\theta,\varphi)$, il est possible d'écrire $A^{(N)}_{f/i}$ sous une forme plus contractée :

$$A^{(N)}_{f/i} = \langle f|(\vec{\varepsilon}.\hat{r})^{N}|i\rangle \quad (D.5)$$

---

(*) Une telle amplitude correspond formellement à la seule partie angulaire de l'élément de matrice de transition, relatif à un processus d'ionisation multiphotonique.

On peut transformer également l'expression de $|f\rangle$ entrant dans cette amplitude(*) :

$$|f\rangle = \sum_{L,M} Y_{L,M}(\theta,\varphi)\, Y^{*}_{L,M}(\alpha,\beta) = \frac{1}{\sin\theta}\,\delta(\alpha-\theta)\,\delta(\beta-\varphi) \qquad (D.6)$$

On définit alors une "section efficace totale", (toujours par analogie avec le calcul d'ionisation multiphotonique) :

$$\sigma^{(N)}_{f/i} = \frac{1}{2\ell+1} \sum_{m=-\ell}^{+\ell} \int d\Omega(\alpha,\beta)\, |A^{(N)}_{f/i}|^2 \qquad (D.7)$$

En remplaçant dans l'expression de $\sigma^{(N)}_{f/i}$, l'élément de matrice successivement par la forme compacte (D-5) et la forme développée (D-1), puis identifiant, on obtiendra les règles de sommes cherchées.

La valeur de $\sigma^{(N)}_{f/i}$ dépend de l'état de polarisation du rayonnement c'est-à-dire de la forme de l'opérateur d'interaction dipolaire $\vec{\varepsilon}\,.\,\hat{r}$. Si l'on choisit l'orientation des axes de référence introduite dans le chapitre IV, nous avons explicitement :

Polarisation linéaire : $\vec{\varepsilon}.\hat{r} = \cos\theta = \sqrt{\frac{4\pi}{3}}\, Y_{1,0}(\theta,\varphi)$ (D.8)

Polarisation circulaire (droite) : $\vec{\varepsilon}.\hat{r} = \frac{1}{\sqrt{2}}\sin\theta\, e^{i\varphi} = \sqrt{\frac{4\pi}{3}}\, Y_{1,1}(\theta,\varphi)$ (D.9)

Nous exposons ci-dessous le calcul de $\sigma^{(N)}_{f/i}$ pour chacun des états de polarisation.

## D-1. POLARISATION LINEAIRE

Intégration de la forme compacte (D-5) :

$$A^{(N)}_{f/i} = \sum_{L,M} Y_{L,M}(\alpha,\beta) \int d\Omega(\theta,\varphi)\, Y^{*}_{L,M}(\theta,\varphi)\, \cos^{N}\theta\, Y_{\ell,m}(\theta,\varphi) \qquad (D.10)$$

Compte tenu de la relation de fermeture (D.6), il vient :

$$A^{(N)}_{f/i} = \cos^{N}\alpha\; Y_{\ell,m}(\alpha,\beta) \qquad (D.11)$$

et : $$\sigma^{(N)}_{f/i} = \frac{1}{2\ell+1} \sum_{m} \int d\Omega(\theta,\varphi)\, \cos^{2N}\alpha\, |Y_{\ell,m}(\theta,\varphi)|^2 \qquad (D.12)$$

---

(*) Cf. Réf. 3, Appendice B.10.

En utilisant le théorème d'addition pour les harmoniques sphériques :

$$\frac{1}{2\ell+1}\sum_{m}|Y_{\ell,m}(\theta,\varphi)|^2=\frac{1}{4\pi} \qquad (D.13)$$

on obtient finalement :

$$\sigma_{f/i}^{(N)}=\frac{1}{2}\int_0^{\pi}\sin\alpha\,d\alpha\,\cos^{2N}\alpha=\frac{1}{2N+1} \qquad (D.14)$$

Intégration de la forme développée (D-1) :

On remplace les éléments de matrice $\langle\lambda_j\mu_j|\vec{\varepsilon}.\hat{r}|\lambda_{j-1},\mu_{j-1}\rangle$ par leur expression en fonction des symboles 3-j de Wigner (cf. Ch. IV § 4.3) dans les relations, (D-1) et (D-7).

$$\sigma_{f/i}^{(N)}=\sum_{M}\int d\Omega(\alpha,\beta)\left|\sum_{L,M}Y_{L,M}(\alpha,\beta)[L]^{1/2}\sum_{\lambda_i,\mu_i}[\lambda_1,\lambda_2\ldots\lambda_{N-1}]\right.$$
$$\left.\ldots\begin{pmatrix}L&1&\lambda_{N-1}\\0&0&0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}L&1&\lambda_{N-1}\\-M&0&\mu_{N-1}\end{pmatrix}\ldots\begin{pmatrix}\lambda_1&1&\ell\\0&0&0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\lambda_1&1&\ell\\-\mu_1&0&m\end{pmatrix}\right|^2 \qquad (D.15)$$

où : $[\lambda]=(2\lambda+1)$.

Après avoir intégré, en tenant compte des propriétés d'orthogonalité des harmoniques sphériques, on obtient :

$$\sigma_{f/i}^{(N)}=\sum_{m}\sum_{L,M}\sum_{\text{tous }\lambda_i,\lambda'_i}\sum_{\text{tous }\mu_i\mu'_i}[L,\lambda_{N-1}\ldots\lambda_1,\lambda'_{N-1},\ldots\lambda'_1]\begin{pmatrix}L&1&\lambda_{N-1}\\0&0&0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}L&1&\lambda_{N-1}\\-M&0&\mu_{N-1}\end{pmatrix}$$
$$\ldots\begin{pmatrix}\lambda_1&1&\ell\\0&0&0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\lambda_1&1&\ell\\-\mu_1&0&m\end{pmatrix}\begin{pmatrix}L&1&\lambda'_{N-1}\\0&0&0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}L&1&\lambda'_{N-1}\\-M&0&\mu'_{N-1}\end{pmatrix}\ldots\begin{pmatrix}\lambda'_1&1&\ell\\0&0&0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\lambda'_1&1&\ell\\-\mu'_1&0&m\end{pmatrix} \qquad (D.16)$$

En comparant avec (D.14) on obtient la règle de somme cherchée (V.1.1) qui a la propriété remarquable d'être indépendante de $\ell$.

D-2. POLARISATION CIRCULAIRE

Intégration de la forme compacte (D-1) :

On effectue une analyse similaire à celle que nous avons exposée ci-dessus pour la polarisation linéaire. La "section-

efficace" s'écrit alors :

$$\sigma'^{(N)}_{f/i} = \frac{1}{2^{N+1}} \int_0^{\pi} \sin^{2N+1}\alpha \, d\alpha = \frac{N!}{(2N+1)!!} \qquad (D.17)$$

Intégration de la forme développée (D-5)

L'expression développée de la "section efficace" $\sigma'^{(N)}_{f/i}$ a, tous calculs faits, la forme suivante

$$\sigma'^{(N)}_{f/i} = \sum_m \sum_{L,M} \sum_{\text{tous } \lambda_i \lambda'_i} \sum_{\text{tous } \mu_i, \mu'_i} [L, \lambda_{N-1} \ldots \lambda_1, \lambda'_{N-1} \ldots \lambda'_1] \begin{pmatrix} L & 1 & \lambda_{N-1} \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} L & 1 & \lambda_{N-1} \\ -M & 1 & \mu_{N-1} \end{pmatrix}$$

$$\ldots \begin{pmatrix} \lambda_1 & 1 & \ell \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \lambda_1 & 1 & \ell \\ -\mu_1 & 1 & m \end{pmatrix} \begin{pmatrix} L & 1 & \lambda'_{N-1} \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} L & 1 & \lambda'_{N+1} \\ -M & 1 & \mu'_{N-1} \end{pmatrix} \ldots \begin{pmatrix} \lambda'_1 & 1 & \ell \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \lambda'_1 & 1 & \ell \\ -\mu'_1 & 1 & m \end{pmatrix} \qquad (D.18)$$

La comparaison de cette relation avec l'équation (D.17) donne la dernière règle de somme (V-1.2).

Rappelons qu'à notre connaissance de telles règles de sommes n'ont pas été signalées auparavant. Soulignons par ailleurs qu'il est possible d'en obtenir d'autres en utilisant le même procédé. Y. HENO a pu ainsi donner des formules voisines en étudiant la partie angulaire associée à des processus de diffusion multiphotonique (Effet hyper-raman).

Enfin, nous voudrions souligner la simplicité de cette méthode en comparaison des difficultés rencontrées pour retrouver ces résultats à partir des seules propriétés des symboles 3-j. A ce sujet nous souhaitons remercier A. SUREAU qui a bien voulu vérifier que ces formules n'étaient pas "triviales" et ne pouvaient être retrouvées facilement par un calcul direct.

BIBLIOGRAPHIE

---


1 - J. SCHWINGER Editeur
Selected Papers on Quantum Electrodynamics
(Dover, New York, 1958).

2 - S.S. SCHWEBER
An Introduction to Relativistic Quantum Field Theory
(Row, Peterson and Co. New York, 1961)

3 - A. MESSIAH
Mécanique Quantique
(Dunod, Paris, 1964)

4 - E. PRUGOVEČKI
Quantum Mechanics in Hilbert Space
(Academic Press, London, 1971)

5 - H.F. HAMEKA
Physica, 32, 779, (1966)

6 - N.V. COHAN et H.F. HAMEKA
Phys. Rev. Lett. 16, 478, (1966);
Phys. Rev. 151, 1076, (1966).

7 - R.J. GLAUBER
Quantum Optics and Electronics ; C. de Witt, éditeur
(Gordon and Breach, New York, 1965)

8 - P. LAMBROPOULOS
Phys. Rev. 168, 1418 (1968) ;

B.R. MOLLOW
Phys. Rev. 175, 1555 (1968) ;

G.S. AGARWAL
Phys. Rev. A1, 1445, (1970) ;

J.L. DEBETHUNE
Il Nuovo Cim. 12B, 101, (1972).

9 - E. ARNOUS et Y. HENO
J. de Phys. Radium 19, 443 (1958)

10 - Y. GONTIER et M. TRAHIN
Phys. Rev. 7A, 1899 (1973) ; voir également:
C.R. Acad. Sci. 266, série B, 1177, (1968) ;
ibid. 267, série B, 359, (1968).

11 - P. LAMBROPOULOS
Phys. Rev. 9A, 1992, (1974).

12 - W.H. FURRY
Phys. Rev. 81, 115, (1951)

13 - F. LOW
Phys. Rev. 88, 53, (1952).

14 - A. UNSOLD
Z. Phys. 43, 563, (1927).

15 - A. DALGARNO et J.T. LEWIS
Proc. Phys. Soc. A233, 70 (1955)

16 - C. SCHWARTZ
Ann. Phys. (N.Y.) 6, 156 , (1959) ;
id. 6, 170, (1959).

17 - C. SCHWARTZ et J.J. TIEMANN
Ann. Phys. (N.Y.) 6, 178 (1959).

18 - J. SCHWINGER
J. Math. Phys. 5, 1606, (1964).

19 - W. FOCK
Z. Phys. 98, 145 (1935).

20 - H.A. BETHE et E.E. SALPETER
Quantum Mechanics of one and two-electrons atoms
(Springer-Verlag, Berlin, 1957).

21 - W. ZERNIK et R.W. KLOPFENSTEIN
J. Math. Phys. 6, 262, (1965).

22 - M.H. MITTLEMAN et F.A. WOLF
Phys. Rev. 128, 2686, (1962).

23 - W. ZERNIK
Phys. Rev. 133A , 117 (1964) ; voir également un article précédent de l'auteur sur le même sujet dans lequel la sommation est réduite à un seul terme correspondant à l'état quasi-résonant 3p : Phys. Rev. 132, 320 (1963).

24 - W. ZERNIK
Phys. Rev. 135 A , 51, (1964)

25 - Y. GONTIER et M. TRAHIN
C.R. Acad. Sciences, 264 série B, 499 (1967) ; ibid. 265 série B, 1361 (1967) ; Phys. Rev. 172, 83 (1968).

26 - A. ERDELYI, éditeur.
H. Bateman manuscript project : Higher Transcendental Functions (Mc Graw Hill, New-York, 1955).

27 - A. DECOSTER
Nuovo Cimento, 68 A, 105 (1970).

28 - E.L. INCE
Ordinary differential equations (Dover publications, New York, 1956).

29 - M. ROTENBERG
Ann. Phys. (New-York) 19, 262, (1962); Advances in Atomic and Molecular Physics, D.R. Bates et I. Estermann éditeurs (Academic Press, New York, 1970) Vol. 6.

30 - S. OKUBO et D. FELDMAN
Phys. Rev. 117, 292, (1960).

31 - J.C.Y. CHEN
J. Phys. B Letters, 4, L 102 (1971) ; voir également : A.C. CHEN, J.C.Y CHEN et A.K. RAJAGOPAL, Phys. Rev. 5A, 2686, (1972).

32 - J.C.Y. CHEN et A.C. CHEN
Advances in Atomic and Molecular Physics, D.R. Bates et I. Estermann éditeurs (Academic Press, New York, 1972) Vol.8, 71.

33 - L. HOSTLER
J. Math. Phys. 5, 591, (1964) ; voir également l'article préliminaire de : L. HOSTLER et R.H. PRATT, Phys. Rev. Lett. 10, 469, (1963).

34 - H. BUCHHOLZ
The confluent hypergéométric function (Springer-Verlag, Berlin, 1969).

35 - R.A. MAPLETON
Phys. Rev. 117, 479, (1960) ; J. Math. Phys. 2, 478, (1961).

36 - S. KLARSFELD
Lett. Nuovo Cimento 1, 682 (1969) ; ibid. 2, 548, (1969) ; ibid. 3, 395, (1970).

37 - S. KLARSFELD et A. MAQUET
Phys. Lett. 43B, 201 (1973).

38 - L. HOSTLER
J. Math. Phys. 5, 1235, (1964).

39 - H.F. HAMEKA
J. Chem. Phys. 47, 2728, (1967).

40 - S.I. VETCHINKIN et V.L. BACHRACH
Int. J. Quantum Chem. 6, 143, (1972).

41 - M. GAVRILA
Phys. Rev. 163, 147 (1967).

42 - B.A. ZON et L.P. RAPOPORT
Sov. Phys. J.E.T.P. Lett. 7, 52, (1968).

43 - L.P. RAPOPORT et B.A. ZON
Phys. Lett. 26A, 564, (1968).
B.A. ZON, N.L. MANAKOV et L.P. RAPOPORT
Sov. Phys. J.E.T.P. 28, 480, (1969).

44 - L.P. RAPOPORT, B.A. ZON et N.L. MANAKOV
Sov. Phys. J.E.T.P. 29,220, (1969).

45 - M. GAVRILA et A. COSTECU
Phys. Lett. 28A, 614, (1969) ; Phys. Rev. 2A, 1752 (1970).

46 - M. GAVRILA
Lett. Nuovo Cimento, 2, 180, (1969) ; Phys. Rev. 6A, 1348 (1972) ; ibid. 1360 (1972).

47 - V.G. GORSHKOV et V.S. POLIKANOV
Sov. Phys. J.E.T.P. Lett. 9, 279, (1969).

48 - C. FRONSDAL
Phys. Rev. 179, 1513, (1969); voir également l'article précédent : ibid. 156, 1665, (1967).

49 - J.P. GAZEAU
C.R. Acad. Sc. Paris 272 B, 501, (1971).

50 - J.P. GAZEAU et A. MAQUET
C.R. Acad. Sc. Paris 272B ,1097 (1971).

51 - P. APPELL et J. KAMPE DE FERIET
"Fonctions hypergéométriques et hypersphériques. Polynômes d'Hermite"(Gauthier - Villars, Paris 1926).

52 - S. KLARSFELD
Phys. Rev. 6A, 506, (1972).

53 - M. BANDER et C. YTZYCKSON
Rev. Mod. Phys. 38, 330, (1966).

54 - H.A. BETHE
Phys. Rev. 72, 339, (1947).

55 - B.E. LAUTRUP, A. PETERMAN et E. DE RAFAEL
Physics Reports 3C, 193, (1972).

56 - W.E. LAMB, Jr. et R.C. RETHERFORD
Phys. Rev. 72, 241, (1947).

57 - W.E. LAMB, Jr. et T.M. SANDERS, Jr.
Phys. Rev. 119, 1901, (1960).

L.R. WILCOX et W.E. LAMB, Jr.
Phys. Rev. 119, 1915, (1960).

58 - C.W. FABJAN, F.M. PIPKIN et E. SILVERMAN
Phys. Rev. Lett. 26, 347, (1971).

C.W. FABJAN et F.M. PIPKIN
Phys. Lett. 36A, 69, (1971) ; Phys. Rev . 6A, 556, (1972).

59 - B.N. TAYLOR, W.H. PARKER et D.N. LANGENBERG
Rev. Mod. Phys. 41, 375, (1969) ; revue des résultats théoriques et expérimentaux antérieurs à 1969.

60 - M. GLASS-MAUJEAN et J.P. DESCOUBES
C.R. Acad. Sci. Paris, 273B, 721 (1971).

61 - H.J. BEYER et H. KLEINPOPPEN
J. of Physics, 5B, L12, (1972).

62 - M. BAUMANN et A. EIBOFNER
Phys. Lett. 43A, 105, (1973).

63 - A. EIBOFNER
Phys. Lett. 47A, 399, (1974).

64 - S. CHURASSY, M.L. GAILLARD et J.D. SILVER
Phys. Rev. Lett. 33, 185, (1974).

65 - M. LEVENTHAL, D.E. MURNICK et H.W. KUGEL
Phys. Rev. Lett. 28, 1609, (1972).

66 - G.P. LAWRENCE, C.Y. FAN et S. BASHKIN
Phys. Rev. Lett. 28, 1612, (1972).

67 - H.W. KUGEL, M. LEVENTHAL et D.E. MURNICK
Phys. Rev. 6A, 1306, (1972).

68 - M. LEVENTHAL et P.E. HAVEY
Phys. Rev. Lett. 32, 808, (1974).

69 - N.A. NARASIMHAM et R.L. STROMBOTNE
Phys. Rev. 4A, 14, (1971).

70 - M. LEVENTHAL
Nucl. Instr. Methods, 110, 343, (1973).

71 - T.W. HÄNSCH, I.S. SHAHIN et A.L. SCHAWLOW
Nature (Phys. Sci.) 235, 63, (1972)

72 - D.L. MADER, M. LEVENTHAL et W.E. LAMB, Jr.
Phys. Rev. 3A, 1832, (1971).

73 - G.W. ERICKSON et D.R. YENNIE
Ann. Phys. (New-York) 35, 271, (1965) ; ibid. 35, 447,(1965).

74 - G.W. ERICKSON
Phys. Rev. Lett. 27, 780, (1971).

75 - T. APPELQUIST et S.J. BRODSKY
Phys. Rev. Lett. 24, 562, (1970).

R. BARBIERI, J.A. MIGNACO et E. REMIDDI
Lett. Nuovo Cimento, 3, 588, (1970) ; Nuovo Cimento, 6A, 21, (1971).

76 - A. PETERMAN
Phys. Lett. 38B, 330, (1972) ; preprint TH-1566, CERN(1972)

77 - M. LIEBER
Phys. Rev. 174, 2037, (1968).

78 - R.W.HUFF
Phys. Rev. 186, 1367, (1969).

79 - J.M. HARRIMAN
Phys. Rev. 101, 594, (1956).

80 - J.D. GARCIA et J.E. MACK
J. Opt. Soc. Am. 55, 654, (1965).

81 - H.A. BETHE, L.M. BROWN et J.R. STEHN
Phys. Rev. 77, 370, (1950).

82 - S. KLARSFELD et A. MAQUET
Phys. Lett. 43B, 201, (1973).

83 - W. MAGNUS, F. OBERHETTINGER et R.P. SONI
Formulas and theorems for the special functions of mathematical Physics (Springer Verlag , Berlin, 1966).

84 - H.J. ANDRÄ
Phys. Scripta 9 , 257, (1974).

85 - Ya. I. GRANOVSKI
Sov. Phys. J.E.T.P. 29, 333, (1969).

86 - L. HOSTLER
J. Math. Phys. 11, 2966, (1970).

87 - B.A. ZON, N.L. MANAKOV et L.P. RAPOPORT
Sov. J. Nucl. Phys. 15, 282 (1972).

N.L. MANAKOV, L.P. RAPOPORT et S.A. ZAPRYAGAEV
Phys. Lett. 43A, 139, (1973) ; ibid. 48A, 145, (1974) ; J. of Phys. 7B, 1076, (1974).

88 - L. SCHWARTZ
Méthodes Mathématiques pour les sciences physiques (Hermann, Paris 1965).

89 - I.S. GRADSHTEIN et I.W. RYSHIK
Table of Integrals, series and products (Academic Press, New York, 1965).

90 - A.H., STROUD et Don SECREST
Gaussian Quadrature Formulae (Prentice Hall Inc., Englewood Cliffs, N.J., 1966).

91 - W. GORDON
Ann. der Phys. (5) 2, 1031 (1929).

92 - B.H. ARMSTRONG et H.P. KELLY
J. Opt. Soc. Am. 49, 949, (1959).

93 - M.H. ABRAMOWITZ et I.A. STEGUN
Handbook of Mathematical Functions (Dover ; New-York, 1968).

94 - G.S. KHANDELWAL et E.E. FITCHARD
Ap. J. 173, 737, (1972).

95 - W.J. KARZAS et R. LATTER
Ap. J. Suppl. 6, 167, (1961).

96 - J.P. VINTI
Phys. Rev. 41, 432, (1932).

97 - P.J. MOHR
A paraître dans Ann. Phys. (N.Y.).

98 - J. BLOMQVIST
Nucl. Phys. 48B, 95, (1972).

99 - CHI-KWAN AU et G. FEINBERG
Phys. Rev. 9A , 1794, (1974).

100 - M. GÖPPERT-MAYER
Ann. Physik 9, 273 , (1931).

101 - G. BREIT et E. TELLER
Astrophys. J. 91, 215 (1940).

102 - J. SHAPIRO et G. BREIT
Phys. Rev. 113, 179, (1959).

103 - R. MARRUS
Atomic Physics 3, 291 (Proceedings of the third International Conference on Atomic Physics, 1972, Boulder, Colorado ; Plenum Press ; New York, 1973).

104 - G.W.F. DRAKE
Atomic Physics 3, 269, (Proceedings of the third International Conference on Atomic Physics, 1972, Boulder, Colorado, Plenum Press ; New York, 1973).

W.R. JOHNSON
Phys. Rev. Lett. 29, 1123 (1972).

105 - S. KLARSFELD
Phys. Lett. 30A, 382, (1969).

106 - V. JACOBS
Phys. Rev. 4A, 939, (1971) ; (état $2^1S_o$ de l'hélium)

M.H. PRIOR et H.A. SHUGART
Phys. Rev. Lett. 27, 902, (1971) ; (état $2^1S_o$ de $Li^+$)

R.W. SCHMIEDER
Phys. Rev. 7A, 1458, (1973) ; (Desexcitation à 2 ou 3 photons des états $^3P_o$)

107 - W. KAISER et C.G.B. GARRETT
Phys. Rev. Lett. 7, 229, (1961).

108 - R.G. MEYERAND, Jr. et A.F. HAUGHT
Phys. Rev. Lett. 11, 401, (1963) ; ibid. 13, 7 (1964).

109 - L.V. KELDYSH
Sov. Phys. J.E.T.P. 20, 1307, (1965).

110 - A.M. PERELOMOV, V.S. POPOV et M.V. TERENT'EV
Sov. Phys. J.E.T.P. 23, 924, (1966) ; ibid. 24, 207, (1967) ; ibid. 25, 336, (1967).

111 - P. AGOSTINI, G. BARJOT, G. MAINFRAY, C. MANUS et J. THEBAULT
I.E.E.E.J. Quantum Electron. Q.E.6, 782, (1970).

112 - H.B. BEBB et A. GOLD
Phys. Rev. 143, 1, (1966).

113 - H.B. BEBB
Phys. Rev. 149, 25, (1966) ; ibid. 153, 23, (1967).

114 - E.J. ROBINSON et S. GELTMAN
Phys. Rev. 153, 4 (1967) ; cf. également les articles précédents de S. GELTMAN, Phys. Lett. 4, 186, (1963) ; ibid. 19, 616 (E), (1965).

115 - V.M. MORTON
Proc. Phys. Soc. 92, 301, (1967).

116 - F.T. CHAN et C.L. TANG
Phys. Rev. 185, 42, (1969).

117 - E. KARULE
J. of Phys. 4B, L67, (1971).

118 - Y. GONTIER et M. TRAHIN
Phys. Lett. 36A, 463, (1971) ; Phys. Rev. 4A, 1896, (1971).

119 - B.A. ZON, N.L. MANAKOV et L.P. RAPOPORT
Sov. Phys. J.E.T.P. 33, 683, (1971) Excitation multiphotonique ; Sov. Phys. J.E.T.P. 34, 515, (1972) Ionisation multiphotonique.

120 - J. MIZUNO
J. of Phys. 6B, 314, (1973).

121 - E. ARNOUS, S. KLARSFELD et S. WANE
Phys. Rev. 7A, 1559, (1973).

122 - Y. GONTIER et M. TRAHIN
Phys. Rev. 7A , 2069, (1973).

123 - T. OHNO et T. OKUDA
J. Phys. Soc. Jap. 35, 1161, (1973).

124 - S. KLARSFELD et A. MAQUET
J. of Phys. 7B, L 228, (1974).

125 - A. MAQUET
Phys. Lett. 48A, 199, (1974).

126 - H.R. REISS
Phys. Rev. Lett. 29, 1129, (1972).

127 - P.I. RICHARDS
Phys. Rev. 73, 254, (1948).

E.A. POWER et S. ZIENAU
Phil. Trans. Roy. Soc. 251 A , 427, (1958).

J. FIUTAK
Can. J. Phys. 41, 12, (1963).

128 - Z. FRIED
Phys. Rev. 8A, 2835, (1973).

129 - V.A. KOVARSKIĬ et N.F. PEREL'MAN
Sov. Phys. J.E.T.P. 34, 738, (1972).

130 - J.J. SAKURAI
Advanced Quantum Mechanics (Addison-Wesley, Reading, Mass. 1967).

131 - P.A.M. DIRAC
The principles of Quantum Mechanics (Oxford Univ. Press., London, 1958).

132 - G. BAYM
Lectures on Quantum Mechanics (Benjamin, Reading, Mass.,1973)

133 - Y. HENO
(à paraître)

134 - G. BREIT et H.A. BETHE
Phys. Rev. 93, 888, (1954).

135 - R.A. FOX, R.M. KOGAN et E.J. ROBINSON
Phys. Rev. Lett. 26, 1416, (1971).

136 - R.M. KOGAN, R.A. FOX, G.T. BURNHAM et E.J. ROBINSON
Bull. Am. Phys. Soc. 12, 1411, (1971).

137 - P. LAMBROPOULOS
Phys. Rev. Lett. 28, 585, (1972) ; voir également l'article postérieur consacré à la polarisation circulaire : ibid. 29, 453, (1972).

138 - S. KLARSFELD et A. MAQUET
Phys. Rev. Lett. 29, 79, (1972).

139 - A.R. EDMONDS
Angular momentum in Quantum Mechanics (Princeton University Press ; Princeton, New Jersey, 1960).

140 - V.A. DAVYDKIN, B.A. ZON, N.L. MANAKOV et L.P. RAPOPORT
Sov. Phys. J.E.T.P., 33, 70, (1972).

141 - E.P. WIGNER
Phys. Rev. 73,1002, (1948).

142 - S. WANE
Thèse de Doctorat de 3ème cycle. Université de Paris-Sud (1972).

143 - P. AGOSTINI et P. BENSOUSSAN
App. Phys. Lett. 24, 216, (1974).

144 - M.R. CERVENAN et N.R. ISENOR
Opt. Comm. 10, 280 (1974).

145 - C. COHEN TANNOUDJI, J. DUPONT-ROC, C. FABRE et G. GRYNBERG
Phys. Rev. 8A, 2747, (1973).

146 - A. DECOSTER
Phys. Rev. 9A, 1446, (1974).

147 - F.H.M. FAISAL
J. of Phys. 5B, L233, (1972) ; 6B, L89, (1973) ; 7B; L393, (1973).
R. PARZYŃSKI
Phys. Lett. 43A, 171, (1973) ; Acta Phys. Pol. 741, (1973)

R.N. DE WITT
J. of Phys. 6B, L93, (1973).

G. LAPLANCHE, M. JAOUEN et A. RACHMAN
Opt. Comm. 8, 37, (1973).

B.J. CHOUDHURY
J. of Phys. 6B, 2268, (1973).

148 - C. COHEN TANNOUDJI
Cours du College de France (1974-1975).

149 - M. IANNUZZI et E. POLACCO
Phys. Rev. Lett. 13, 371 (1964).

150 - P.M. MORSE et H. FESHBACH
Methods of Theoretical Physics
(Mc. Graw-Hill, New York, 1963).

151 - E.C. TITCHMARSH
Eigenfunction expansions associated with 2nd order differential equations ; Vol I 1946 ; Vol II 1958 (Oxford University Press ; London).

152 - N.B. DELONE et G.K. PISKOVA
Sov. Phys. JETP 31, 403 (1970).

153 - B. HELD, G. MAINFRAY, C. MANUS et J. MORELLEC
Phys. Lett. 35A, 257 (1971).

154 - P. LAMBROPOULOS
Phys. Lett. 40A, 199 (1972).

155 - S.L. CHIN et N.R. ISENOR
Can. J. Phys. 48, 1445 (1970).

156 - M. LU VAN, G. MAINFRAY, C. MANUS et I. TUGOV
Phys. Rev. 7A, 91 (1973).

157 - G. KÄLLEN
Quantum Electrodynamics (Springer-Verlag, Berlin, 1972).

158 - M. SCULLY et W.E. LAMB
Phys. Rev. 159, 208 (1967).

159 - W. HEITLER
The Quantum Theory of Radiation (Oxford University press ; IIIrd Ed. London , 1954).

160 - C.S. CHANG et P. STEHLE
Phys. Rev. 4A, 641 (1971).

161 - C.S. CHANG
Phys. Rev. 9A , 1769 (1974).

162 - B. HELD, G. MAINFRAY, C. MANUS, J. MORELLEC et F. SANCHEZ
Phys. Rev. Lett. 30, 423 (1973).

163 - J. BAKOS, A. KISS, L. SZABO et M. TENDLER
Phys. Lett. 39A, 283 (1972) ; ibid. 41A, 163 (1972).

164 - M. MIZUSHIMA
Phys. Rev. 133A, 414 (1964).

165 - B. DUBREUIL, P. RANSON et J. CHAPELLE
Phys. Lett. 42A, 323 (1972).

B. DUBREUIL et J. CHAPELLE
Phys. Lett. 46A, 451 (1974).

166 - P.F. LIAO et J.E. BJORKHOLM
Phys. Rev. Lett. 34, 1 (1975).

167 - Y. GONTIER, N. RAHMAN et M. TRAHIN
Phys. Rev. Lett. 34, 779 (1975).

168 - H.R. REISS
Phys. Rev. A1, 803 (1970).

169 - A. DECOSTER
Phys. Rev. 9A, 1446 (1974). Cette référence contient une bonne bibliographie des travaux basés sur la théorie de Reiss.

170 - W.C. HENNEBERGER
Phys. Rev. Lett. 21, 838 (1968);

C.K. CHOI, W.C. HENNEBERGER et F.C. SANDERS
Phys. Rev. 9A, 1895 (1974).

171 - S. GELTMAN et M. R. TEAGUE
J. of Phys. 7B , L22 (1974).

172 - M.H. MITTELMAN
Phys. Lett. 47A, 55 (1974).

J. GERSTEN et M.H. MITTLEMAN
Phys. Rev. 10A , 74 (1974).

173 - 1rst European Study Conference on multiphoton Processes (SEILLAC , 1975) non publié.

174 - M. LEVENTHAL
Phys. Rev. 11A , 427 (1975).

175 - T.W. HÄNSCH, S.A. LEE, R. WALLENSTEIN et C. WIEMAN
Phys. Rev. Lett. 34, 307 (1975).

176 - P. CVITANOVIC et T. KINOSHITA
Phys. Rev. 10D, 4007 (1974).

177 - S.L. ADLER
Phys. Rev. 10D, 3714 (1974) une des références les plus récentes sur le sujet.

178 - N.M. KROLL et K.M. WATSON
Phys. Rev. 8A, 804 (1973) ; voir également :

Y. GONTIER et N.K. RAHMAN
Lett. Nuovo Cimento 9, 537 (1974).

N.K. RAHMAN
Phys. Rev. 10A, 440 (1974).

179 - C. LECOMTE, G. MAINFRAY, C. MANUS et F. SANCHEZ
Phys. Rev. 11A, 1009 (1975).

180 - I. BIALYNCKI-BIRULA et Z. BIALYNCKA-BIRULA
Phys. Rev. 8A, 3146 (1973).

181 - B. CAGNAC, G. GRYNBERG et F. BIRABEN
J. Phys. (Paris) 34, 845 (1973).